УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

1000

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

2023, ТОМ 23, НОМЕР 6 (НОЯБРЬ–ДЕКАБРЬ)

ISSN 2226-1494 (PRINT), 2500-0373 (ONLINE)

 $\pi \alpha$

A TT TC

ОПТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ

Моделирование освещенности земно	й поверхности	для выбора	режимов работы
источника излучения			

Люминесцентная динамика кислородного окисления Viburnum opulus L. в растворах хитозана с наночастицами золота

АВТОМАТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ И РОБОТОТЕХНИКА

Динамическое поверхностное управление всенаправленным мобильным роботом с полными ограничениями состояния и насыщением входа (на англ. яз.)

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ

Двухдлинноволновая цифровая голографическая интерферометрия в технических приложениях

Структурный анализ наночастиц ZrO2 и TiO2 (на англ. яз.)

Влияние покрытий поливинилбутираля с углеродными квантовыми точками

на характеристики кремниевых солнечных элементов

Численный алгоритм поиска оптимального состава реагирующей смеси на основе кинетической модели реакции

Рамановская спектроскопия нанокомпозитов ZnO/ZnS и ZnO/ZnSe, полученных методом сольвотермического микроволнового синтеза (на англ. яз.)

КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Эмоциональный анализ данных социальных сетей с использованием кластерной вероятностной нейронной сети с параллелизмом данных (на англ. яз.)

Оценка возможности применения метода декомпозиции изображений

по топологическим признакам для уменьшения энтропии при их сжатии

Реализация нейронных сетей в методе многоуровневых компонентных цепей Алгоритм контроллера нечеткой логики для размещения файлов в системе хранения данных

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ И КОГНИТИВНЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Персонализация сверточных нейронных сетей в задаче обнаружения стресса с использованием данных вариабельности сердечного ритма (на англ.яз.) Использование топологического анализа данных для построения байесовских нейронных сетей

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Метод моделирования вязкоупругих свойств ориентированных полимерных материалов с помощью многобарьерной теории

Проектирование микрополосковой патч-антенны на основе метаматериала SSRR для терагерцового диапазона с использованием алгоритма оптимизации Fennec Fox (на англ. яз.)

Алгоритм оперативного поддержания температурного режима блоков усиления мощности передающего комплекса радиолокационной станции на основе тепловой модели

Конвективный теплообмен и гидродинамика течения у торцевой стенки лопатки турбины под действием магнитного поля (на англ. яз.)

Методы бесконтактной регистрации информационных сигналов для аудита информационной безопасности систем и сетей электроснабжения

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Оценивание параметров синхронного двигателя с постоянными магнитами Проблемы защиты содержимого внутренней памяти микроконтроллеров Renesas

Алтухов А.И., Коршунов Д.С.	10//
Цибульникова А.В., Землякова Е.С., Артамонов Д.А., Слежкин В.А., Самусев И.Г., Зюбин А.Ю., Брюханов В.В.	1084
Чжицян Ч., Краснов А.Ю., Дучжэшэн Л., Цюшэн Я.	1096
Алексеенко И.В., Кожевникова А.М.	1106
Инанова Г	1114
Корчагин В.Н., Сысоев И.А., Ратушный В.И., Митрофанов Д.В., Чапура О.М.	1122
Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф.	1128
Рати И., Рини А.С., Акраджас А.У., Агустин М.	1136
Старлин Джини С., Ченталир Индра Н.	1143
Абакумов А.В., Еремеев С.В.	1152
Кочергин М.И. Татарникова Т.М., Архипцев Е.Д.	1162 1171
Доброхвалов М.О., Филатов А.Ю.	1178
Ватьян А.С., Гусарова Н.Ф., Добренко Д.А., Панкова К.С., Томилов И.В.	1187
Головина В.В., Рымкевич П.П.	1198
Кумари С., Кумар А., Анбалаган Э., Кумар Тоти К., Шарма М.	1205
Шафир Р.С., Давыдова М.А., Корпусов М.О., Перлов А.Ю., Тимошенко А.В.	1214
Арджун К.С., Тайд П.С.	1223

Гришенцев А.Ю., Арустамов С.А., Кармановский Н.С., 1233 Горошков В.А., Чернов Р.И.

Пыркин А.А., Ведяков А.А., Голубев А.К.	1242
Кондрашов К.К., Левина А.Б.	1247

Главный редактор — В.О. Никифоров, д.т.н., профессор

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Беззатеев С.В. — д.ф.-м.н., доцент (Россия) Беликов А.В. — д.ф.-м.н., профессор (Россия) Бессмертный И.А. — д.т.н., профессор (Россия) Бобцов А.А. — д.т.н., профессор (Россия) Бухановский А.В. — д.т.н. (Россия) Волков К. Н. — д.ф.-м.н. (Великобритания) Дукельский К.В. — д.т.н., доцент (Россия) **Ефимов Д.В.** — PhD (Франция) Заколдаев Д.А. — к.т.н., доцент (Россия) **Иорш И.В.** — д.ф.-м.н. (Россия) Кармановский Н.С. (заместитель главного редактора) — к.т.н. доцент (Россия) Комаров И.И. — к.ф.-м.н., доцент (Россия) Матвеев Ю.Н. — д.т.н. профессор (Россия) Никоноров Н.В. — д.т.н., профессор (Россия) Полищук Г.С. — к.т.н. (Россия) Романов А.Е. — д.ф.-м.н., профессор (Россия) Сидоркина И.Г. — д.т.н., профессор (Россия) Степанов О.А. — д.т.н., профессор (Россия) Татарникова Т.М. — д.т.н., доцент (Россия) Тимофеев А. В. — д.т.н. (Казахстан) Успенская М.В. — д.т.н., профессор (Россия) Цыпкин А. Н. — д.ф.-м.н. (Россия)

Ответственный секретарь — И.В. Малькова

Учредитель: Университет ИТМО

Издание зарегистрировано в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (свидетельство ПИ №ФС77-67990 от 6 декабря 2016 г.).

Языки журнала: русский, английский.

ISSN 2226-1494 (print version), ISSN 2500-0373 (online version) Англоязычное название: «Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics». Транслитерированное название: «Nauchno-Tekhnicheskii Vestnik Informatsionnykh Tekhnologii, Mekhaniki i Optiki». Сокращенное название: «Sci.Tech. J. Inf. Technol. Mech. Opt.»

Журнал включен в каталог периодических изданий Ulrich's Periodical Directory.

Журнал входит в крупнейшие международные реферативные и наукометрические базы Scopus, EBSCO, ProQuest, EastView, ИВИС и другие.

Журнал входит в утвержденный Высшей аттестационной комиссией «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, выпускаемых в Российской Федерации, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени доктора и кандидата наук».

Периодичность издания — 6 выпусков в год. Плата за публикации и редактирование не взимается.

Редакторы: Ю.В. Михайлова, Л.Н. Точилина, Т.В. Точилина Перевод — Н.А. Корнев Компьютерная верстка — Е.С. Егорова Сайт — К.В. Малькова

Оф. 2136, Университет ИТМО, ул. Ломоносова, д. 9, Санкт-Петербург, Российская Федерация, 191002

> Телефон (812) 480 02 75 http://ntv.ifmo.ru E-mail: ntvitmo@itmo.ru

Статьи Журнала доступны по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» 4.0 Всемирная. Editor-in-Chief - Vladimir O. Nikiforov, D.Sc., Professor

EDITORIAL BOARD

Sergey V. Bezzateev - D.Sc., Associate Professor (Russia) Andrey V. Belikov — D.Sc., Professor (Russia) Igor A. Bessmertny - D.Sc., Professor (Russia) Alexey A. Bobtsov — D.Sc., Professor (Russia) Alexandr V. Boukhanovsky – D.Sc. (Russia) Konstantin N. Volkov – D.Sc. (Great Britain) Konstantin V. Dukelskii – D.Sc., Associate Professor (Russia) **Denis V. Efimov** — PhD (France) Danil A. Zakoldaev — PhD, Associate Professor (Russia) Ivan V. Iorsh – D.Sc. (Russia) Nikolai S. Karmanovskiy (Deputy Chief Editor) - PhD, Associate Professor (Russia) Igor I. Komarov — PhD, Associate Professor (Russia) Iuri N. Matveev — D.Sc., Professor (Russia) Nikolay V. Nikonorov - D.Sc., Professor (Russia) Grigorii S. Polishchuk — PhD (Russia) Alexey E. Romanov – D.Sc., Professor (Russia) Irina G. Sidorkina – D.Sc., Professor (Russia) Oleg A. Stepanov – D.Sc., Professor (Russia) Tatiana M. Tatarnikova - D.Sc., Associate Professor (Russia) Andrey V. Timofeev - Dr. habil. Sc. (Kazakhstan) Mayya V. Uspenskaya - D.Sc., Professor (Russia) Anton N. Tcypkin – D.Sc., Professor (Russia)

Executive secretary - Irina V. Malkova

Founder: ITMO University

Publication is registered by the Federal Inspectorate Service for Communication, Information Technologies and Communication Media, certificate PI FS77-67 990 dated December, 6th, 2016.

Languages of the journal: Russian, English

ISSN 2226-1494 (print version), ISSN 2500-0373 (online version) The English title is "Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics".

Transliterated title is "Nauchno-Tekhnicheskii Vestnik Informatsionnykh Tekhnologii, Mekhaniki i Optiki".

Abbreviated parallel title: "Sci.Tech. J. Inf. Technol. Mech. Opt." The journal is catalogued in Ulrich's Periodical Directory.

The journal is catalogued in Ulrich's Periodical Directory.

The journal is included in the largest international abstract and scientometric databases Scopus, EBSCO, ProQuest, East View, EVIS and others.

The journal is included in the "List of leading scientific journals and periodicals under review in the Russian Federation, where the main scientific results of theses for the PhD and doctor of sciences degree must be published" approved by the Higher Attestation Commission.

Publication frequency is 6 times a year. **Publication and editing are free of charge.**

Editors: Yulia V. Mikhailova, Lyubov N. Tochilina, Tatiana V. Tochilina English Language Technical Editor — Nikolay A. Kornev Computer layout — Ekaterina S. Egorova Website — Kseniia V. Malkova

> of. 2136, ITMO University, Lomonosova Street, 9, St.Petersburg, 191002, Russia

> > Phone (812) 480 02 75 http://ntv.ifmo.ru/en E-mail: ntvitmo@itmo.ru



Подписано к печати 01.12.2023 Пираж 350 экз. Заказ № 96 (148)

Издание Университета ИТМО

Отпечатано в ООО «Университетские телекоммуникации»

Адрес: 199034, Санкт-Петербург, Биржевая линия, д. 16

© Университет ИТМО

Ι/ΪΤΜΟ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

ОПТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ OPTICAL ENGINEERING

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1077-1083 УДК 535.2

Моделирование освещенности земной поверхности для выбора режимов работы источника излучения

Александр Иванович Алтухов¹, Денис Сергеевич Коршунов²

1.2 Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация

¹ aai 51@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-4105-0296

² korshunov.denis@rambler.ru[⊠], https://orcid.org/0000-0001-6344-2533

Аннотация

Введение. Предложен подход к получению светосигнальных характеристик в графоаналитическом виде для обоснования режимов работы излучающей аппаратуры оптико-электронных комплексов дистанционного зондирования Земли. Данные комплексы применяются для ведения съемки в условиях недостаточной естественной освещенности местности по причине сложного рельефа, географического положения района или низкого положения Солнца над плоскостью местного горизонта. Методы. С использованием представленной модели проведены расчеты энергетической освещенности земной поверхности. Построены зависимости, учитывающие влияние на распределение спектральной плотности потока электромагнитного излучения положения Солнца над плоскостью местного горизонта для конкретных дат и суточного времени. Основные результаты. Получены светосигнальные характеристики, которые можно использовать для обоснования режимов работы излучающей аппаратуры оптико-электронных комплексов. На основе светосильных характеристик сделан вывод о необходимости искусственного усиления спектральной плотности потока излучения в заданном диапазоне спектра с целью достижения требуемой освещенности снимаемого участка земной поверхности на конкретные дату и время. Усиление спектральной плотности потока излучения позволило создать экспозицию, требуемую для формирования изображений с высокими изобразительными свойствами. Обсуждение. Результаты выполненного моделирования могут найти применение в задаче прогнозирования качества изображений, полученных с использованием искусственных источников оптической подсветки. Предложенный подход позволяет получить изображения, характеризуемые высоким значением линейного разрешения на местности, не прибегая к повышению времени накопления заряда фотоприемным устройством регистрирующей аппаратуры. Применение рассмотренного подхода наиболее актуально в условиях ведения аэрокосмической съемки.

Ключевые слова

оптическая подсветка, светосигнальная характеристика, оптико-электронное комплексы

Ссылка для цитирования: Алтухов А.И., Коршунов Д.С. Моделирование освещенности земной поверхности для выбора режимов работы источника излучения // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1077–1083. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1077-1083

Modeling the illumination of the Earth's surface to select the operating modes of the radiation source

Alexander I. Altuchov¹, Denis S. Korshunov²⊠

1,2 Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation

¹ aai_51@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-4105-0296

² korshunov.denis@rambler.ru^{\vee}, https://orcid.org/0000-0001-6344-2533

Abstract

An approach to obtain light-signal characteristics in graphoanalytical form is proposed to substantiate the operating modes of the emitting equipment of active optoelectronic complexes of remote sensing of the Earth. These complexes are used for shooting in conditions of insufficient natural illumination of the terrain due to the difficult terrain, geographical location of the area or the low position of the Sun above the plane of the local horizon. Using the presented model,

© Алтухов А.И., Коршунов Д.С., 2023

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

calculations of the energy illumination of the Earth's surface were carried out, dependencies were constructed that take into account the influence of the position of the Sun above the local horizon plane for specific dates and daily time on the distribution of the spectral density of the electromagnetic radiation flux. Light-signal characteristics have been obtained, which can be used to justify the operating modes of the emitting equipment of active optoelectronic complexes. Based on these characteristics, it is concluded that it is necessary to artificially enhance the spectral density of the radiation flux in a given range of the spectrum in order to achieve the required illumination of the photographed area of the Earth's surface for a specific date and time. The amplification of the spectral density of the radiation flux makes it possible to create the exposure required for the formation of images with high visual properties. The simulation results are used in the problem of predicting the quality of images obtained using artificial sources of optical illumination. The proposed approach makes it possible to obtain images characterized by the high value of linear resolution on the ground, without resorting to increasing the charge accumulation time by the photodetector of the recording equipment. The application of this approach is particularly relevant in the conditions of conducting aerospace surveys.

Keywords

optical illumination, light-signal characteristic, optoelectronic complexes

For citation: Altuchov A.I., Korshunov D.S. Modeling the illumination of the Earth's surface to select the operating modes of the radiation source. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1077–1083 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1077-1083

Введение

Один из элементов процесса планирования применения оптико-электронных систем дистанционного зондирования Земли — экспонометрический расчет, на основе результатов которого выполняется выбор режимов съемки земной поверхности, обеспечивающих получение снимков, применимых для интерпретации [1-5]. В основе экспонометрического расчета лежит использование экспоненциальных функций, широко применяемых для исследования условий роста и деградации процессов, анализа распространения сигналов и других физических явлений. Например, при планировании применения оптико-электронных систем дистанционного зондирования Земли на основе экспоненциальных функций моделируется освещенность земной поверхности с учетом местного времени. Полученные данные используются для выбора оптимального времени съемки, когда угол падения солнечных лучей на земную поверхность обеспечивает экспозицию, требуемую для формирования изображений с высокими изобразительными свойствами.

Также дополнительно в рамках экспонометрического расчета можно оценить изменение освещенности земной поверхности в течение светового дня, что позволяет выполнить коррекцию времени накопления заряда фотоприемным устройством регистрирующей аппаратуры и получить изображение, характеризуемое высоким линейным разрешением на местности. Приведем примеры (рис. 1) снимков местности, учитывающие разные положения Солнца над земной поверхностью. На рис. 1, а, b показаны участки местности, которые не освещены прямыми солнечными лучами и расположены в тени, что существенно снизило качество соответствующих фрагментов изображений. На изображениях (рис. 1, c, d) подобные области видны отчетливо, вследствие правильного учета условий освещенности и выбора соответствующих режимов работы регистрирующей аппаратуры.



Рис. 1. Снимки земной поверхности с центром в точке снятия координат WGS 84 (81.080039, 42.620698), публикуемые картографическими сервисами: ESRI Satellite (*a*); Yandex Satellite (*b*); Google Satellite (*c*); AutoNavi Satellite (*d*)
 Fig. 1. Images of the Earth's surface centered at the point of removal of coordinates WGS 84 (81.080039, 42.620698), published by cartographic services: ESRI Satellite (*a*); Yandex Satellite (*b*); Google Satellite (*c*); AutoNavi Satellite (*d*)

В каждом конкретном случае экспонометрического расчета необходимо учитывать тематическое назначение изображений и режимы работы регистрирующей аппаратуры в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах. Данное утверждение объясняется тем, что в пределах полосы захвата могут находиться участки местности, обладающие различными физическими свойствами в условиях прямого и непрямого освещений Солнцем. Отметим, что выбор соответствующего режима работы регистрирующей аппаратуры не обеспечивает в полной мере получение изображений, применимых для интерпретации. Например, в условиях сложного рельефа местности и при высоких значениях зенитного угла Солнца невозможно добиться экспозиции, требуемой для формирования изображений [1, 6].

Решить обозначенную проблему можно путем применения оптико-электронных комплексов, оснащенных устройствами искусственной оптической подсветки [7–10]. Режимы работы таких устройств должны синхронизироваться с режимами работы регистрирующей аппаратуры на основе светосигнальных характеристик, например, спектральной плотности потока излучения и энергетической освещенности земной поверхности [11].

Цель работы — обоснование выбора параметров работы излучающей аппаратуры оптико-электронных комплексов с учетом естественных условий освещенности земной поверхности.

Модель энергетической освещенности земной поверхности

Основная светосигнальная характеристика, используемая для выбора параметров работы фотоприемного устройства регистрирующей аппаратуры — освещенность земной поверхности, которая создается прямой и рассеянной солнечной радиацией [11, 12]. При этом величина освещенности ограничена свойствами атмосферы, географическими особенностями ландшафта, временем суток и другими факторами. В свою очередь, прямая солнечная радиация — облученность поверхности Земли излучение от Солнца. В верхней границе атмосферы излучение от Солнца охватывает ультрафиолетовую (200–380 нм), видимую (380–780 нм) и инфракрасную (780–450 нм) области спектра, а энергетическая освещенность на границе с атмосферой E_* составляет 1350 Вт/м².

Величину спектральной солнечной постоянной $E_*(\Delta\lambda)$ на границе с атмосферой для диапазона длин волн спектра электромагнитного излучения $[\lambda_1, \lambda_2]$, в котором ведется съемка, найдем по формуле [1, 5]:

λ.

$$E_*(\Delta\lambda) = E_* \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} E(\lambda, T) d\lambda}{\int_{1}^{l_2} E(\lambda, T) d\lambda},$$
(1)

где $\Delta\lambda$ — интервал спектра электромагнитного излучения, в котором ведется съемка; $l_1 = 0,2$ мкм и $l_2 = 4,5$ мкм — нижняя и верхняя границы интервала спектра излучения Солнца; λ_1 и λ_2 — нижняя и верхняя границы интервала спектра излучения, регистрируемого приемником; $E(\lambda, T)$ — спектральная плотность потока излучения, испускаемого единицей поверхности абсолютно черного тела с температурой T на длине волны λ .

Рассчитаем спектральную плотность [1]:

$$E(\lambda, T) = E_* \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1},$$
(2)

где $h = 6,626176 \cdot 10^{-34}$ Дж·с — постоянная Планка; $k = 1,38062 \cdot 10^{-23}$ Дж/К — постоянная Больцмана; $c = 2,9979258 \cdot 10^8$ м/с — скорость света; T — температура абсолютно черного тела (T = 6000 K).

При ведении аэрокосмической съемки суммарную освещенность земной поверхности $E_{\rm C}$ при ясном небе рассчитаем по формуле [1, 13]:

$$E_{\rm C} = E_* \sin h_* \left[e^{-\tau_0 \operatorname{cosec} h_*} + \frac{1 - e^{-\tau_0}}{2} (1 - e^{-\tau_0 \operatorname{cosec} h_*}) \right], \qquad (3)$$

где h_* — высота Солнца над плоскостью местного горизонта; τ_0 — оптическая толщина слоя атмосферы, характеризующая ее прозрачность, как количественная оценка наряду с коэффициентом пропускания $T = e^{-\tau_0}$.

Использование выражения (3) предусматривает вычисление значения эквивалентной толщины поглощающего слоя атмосферы для интервала длин волн $[\lambda_1, \lambda_2]$ по формуле [14]:

$$\tau_{\rm o}(\Delta\lambda) = \frac{1}{\Delta\lambda} \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \tau_{\rm o}(\lambda) d\lambda, \qquad (4)$$

где $\Delta\lambda$ — интервал спектра электромагнитного излучения, в котором ведется съемка; $\tau_0(\lambda)$ — эквивалентная толщина поглощающего слоя атмосферы для заданной длины волны λ .

С учетом выражений (3) и (4), результирующее выражение для оценивания освещенности земной поверхности при ясном небе для спектральных поддиапазонов оптического излучения имеет вид:

$$E_{\rm C}(\Delta\lambda) = E_*(\Delta\lambda) \sin h_* \left[e^{-\tau_0(\Delta\lambda) \operatorname{cosec} h_* + \frac{1 - e^{-\tau_0(\Delta\lambda)}}{2} (1 - e^{-\tau_0(\Delta\lambda) \operatorname{cosec} h_*)} \right].$$
 (5)

В выражении (5) величина освещенности зависит от значения угла высоты Солнца над плоскостью местного горизонта h_* , которое рассчитаем по формуле:

$$\sin h_* = \sin \varphi_* \sin \delta_* + \cos \varphi_* \cos \delta_* \cos t_*, \tag{6}$$

где φ — астрономическая широта объекта съемки; δ_* — склонение Солнца; t_* — часовой угол Солнца в момент времени съемки.

С использованием формул (1)–(6) выполним моделирование энергетической освещенности земной поверхности и построим графоаналитические характеристики спектральной плотности потока электромагнитного излучения, учитывающее положение Солнца на конкретные дату и время. Полученные результаты моделирования могут быть применены для обоснования выбора типов и режимов работы излучающей аппаратуры оптико-электронных комплексов.

Результаты моделирования светосигнальных характеристик источника оптического излучения

На рис. 2 показаны графические зависимости, полученные с использованием формул (5) и (6), демонстрирующие распределение освещенности земной поверхности с учетом даты и времени съемки, а также координат освещаемой точки. Значения освещенности представлены в нормированном виде на интервале от 0 до 1.

Из рис. 2, а видно, что точка земной поверхности с координатами 59°57'00" северной широты и 30°19'00" восточной долготы освещается Солнцем с 00 ч 00 мин 22 июня 2023 года до 00 ч 00 мин 23 июня 2023 года на протяжении 18 ч 50 мин. Максимальное значение освещенности 0,9 приходится на 12 ч 50 мин. Допустим, что пороговое значение, при котором возможно ведение съемки в естественных условиях освещения, составляет 0,4. При этом временной интервал ведения съемки составит с 05 ч 30 мин до 20 ч 45 мин. На рис. 2, b показано существенное сокращение временного интервала освещения Солнцем указанной точки земной поверхности до 05 ч 50 мин в случае выбора даты наблюдения 22 декабря 2023 года. Максимальное значение освещенности 0,55 приходится на 12 ч 55 мин. При аналогичном пороговом значении для ведения съемки в естественных условиях освещения также определим временной интервал ведения съемки — с 11 ч 00 мин до 15 ч 00 мин на выбранную дату.

В случае ведения оптико-электронной съемки добиться получения снимков, применимых для интерпретации, возможно только в условиях достаточной освещенности земной поверхности (рис. 2), что не всегда обеспечивается естественным источником оптического излучения — Солнцем. Согласно формулам (1) и (2), освещенность земной поверхности в видимой области спектра (380–780 нм) зависит от $E_*(\Delta\lambda)$, величина которой определяется спектральной плотностью потока излучения $E(\lambda, T)$. На рис. 3 в графоаналитическом виде представлены зависимости $E(\lambda, T)$ от длины волны для разного времени суток. Получение данных зависимостей применительно к земной поверхности предполагает учет в формуле (2) величины спектрального распределения коэффициента пропускания атмосферы. Для оценки коэффициента пропускания используем выражение [15] вида:

$$\tau_a(\lambda) = f_1(\lambda) f_2(\varphi, \xi), \tag{7}$$

где $\tau_a(\lambda)$ — функция пропускания в зависимости от длины волны излучения для среднестатистического физико-химического состава атмосферы; $f_2(\varphi, \xi)$ функция, учитывающая геофизический и климатический факторы (географическое место, его физические особенности и время года).

С учетом формул (2) и (7) результирующее выражение для расчета спектральной плотности потока излучения запишем в виде:

$$E(\lambda, T) = E_* \tau_a(\lambda) \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1}$$

Из рис. З видно, что величина спектральной плотности потока оптического излучения изменяет свое значение при изменении длины волны, а также времени года и суток, что объясняется изменением величины зенитного угла Солнца. Наиболее высокая спектральная плотность потока наблюдается в диапазоне спектра от 450 до 470 нм. Снижение спектральной плотности потока ведет к ослаблению освещенности снимаемой точки земной поверхности и, как следствие, к необходимости увеличения времени накопления заряда фотоприемным устройством T_{nak} для получения экспозиции, обеспечивающей формирование изображения. В условиях недостаточной освещенности реализация такого подхода затруднена из-за ограничений, накладываемых скоростью бега оптического изображения вследствие



Puc. 2. Зависимости освещенности земной поверхности от даты и времени на 22 июня (*a*) и 22 декабря (*b*) 2023 года *Fig. 2.* Dependence of the illumination of the Earth's surface vs. date and time: as of June 22, 2023 (*a*); as of December 22, 2023 (*b*)



Рис. 3. Зависимости спектральной плотности потока от длины волны на 22 июня (*a*) и 22 декабря (*b*) 2023 года. ЗУС — зенитный угол Солнца

Fig. 3. Dependence of the spectral flux density vs. the wavelength: as of June 22, 2023 (*a*); as of December 22, 2023 (*b*) 3 YC — zenith angle of the Sun

перемещения носителя регистрирующей аппаратуры [1, 14]:

$$T_{nak} = \frac{aN_{TDI}K_{zam}}{V_{im\sigma}},$$
(8)

где *а* — размер элемента фотоприемного устройства; *N_{TDI}* — число шагов накопления заряда (в случае, если используется режим временной задержки и накопления заряда); *V_{img}* — скорость бега оптического изображения в фокальной плоскости; *K_{zam}* — коэффициент тангажного замедления (при отсутствии разворота летательного аппарата по тангажу равен 1).

Восполнить недостаточную естественную освещенность можно путем применения активных оптико-электронных комплексов, оснащенных средствами искусственной подсветки [9]. Параметры оптической подсветки выберем с учетом типа источника оптического излучения, типа регистрирующей аппаратуры, а также условий их взаимного размещения в воздушном или космическом пространстве. Задача источника оптической подсветки — усиление спектральной плотности потока излучения в заданной области спектра для достижения требуемой освещенности снимаемого участка земной поверхности на конкретные дату и время.

Рассчитаем спектральную плотность потока излучения $E_{\Delta}(\lambda, T)$, испускаемого единицей поверхности источника подсветки в единичном интервале длин волн:

$$E_{\Delta}(\lambda, T) = E_{\odot}(\lambda, T) - E(\lambda, T), \qquad (9)$$

где $E_{\odot}(\lambda, T)$ — величина спектральной плотности потока излучения в единичном интервале длин волн, обеспечивающая получение изображений, пригодных для интерпретации.

На рис. 4 показаны графики, демонстрирующие величину усиления спектральной плотности потока



Puc. 4. Величины усиления спектральной плотности потока от длины волны на 22 июня (a) и 22 декабря (b) 2023 года *Fig.* 4. The magnitude of the spectral density gain of the flux vs. the wavelength: as of June 22, 2023 (a); as of December 22, 2023 (b)

излучения в зависимости от длины волны спектра с учетом времени суток. За эталон принят участок кривой в диапазоне длин волн 450–470 нм на дату 22 июня 2023 года. Из рис. 4, *а* видно, что в указанном диапазоне не требуется усиление спектральной плотности потока для создания освещенности, необходимой для формирования изображения на время 13 ч 00 мин. При этом в 14 ч 00 мин такое усиление должно составлять 0,1 Вт·м²·нм⁻¹. На дату 22 декабря 2023 года усиление спектральной плотности потока излучения варьируется в диапазоне 1,7–1,8 Вт·м²·нм⁻¹ в зависимости от времени суток.

С учетом формул (1) и (9), результирующее выражение для определения величины спектральной солнечной постоянной $E_*(\Delta\lambda)$ в диапазоне длин волн спектра электромагнитного излучения $[\lambda_1, \lambda_2]$, в котором ведется съемка с применением активных оптико-электронных комплексов, имеет вид:

$$E_*(\Delta\lambda) = E_* \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} E_{\Delta}(\lambda, T) d\lambda + \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} E(\lambda, T) d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} E(\lambda, T) d\lambda}.$$

Результаты моделирования возможно использовать для оценивания распределения спектральной плотности потока оптического излучения с учетом длин волн спектра электромагнитного излучения, географического положения снимаемой точки и времени съемки для обоснования выбора режимов работы источников излучения и регистрирующей аппаратуры в составе активных оптико-электронных комплексов. Практическое

Литература

- Бакланов А.И. Системы наблюдения и мониторинга: учебное пособие. М.: Бином. 2009. 234 с.
- Юрченко В.И. Особенности проектирования аэрофотосъемочных работ с беспилотного воздушного судна // Вестник СГУГиТ. 2021. Т. 26. № 2. С. 65–81. https://doi.org/10.33764/2411-1759-2021-26-2-65-81
- Емельянов С.Г., Атакищев О.И., Алтухов А.И., Гнусарев Н.В., Коршунов Д.С. К вопросу учета условий освещенности при съемке космических объектов фотографическими средствами // Известия Юго-Западного государственного университета. 2012. № 3-1(42). С. 58–62.
- Хрущ Р.М. Аэрокосмические методы. Часть 1. Аэрокосмические съемки и теория одиночного фотоснимка: учебное пособие. СПб.: Издательство Санкт-Петербургского университета, 2009. 160 с.
- Моисеев В.С. Прикладная теория управления беспилотными летательными аппаратами: монография. Казань: ГБУ «Республиканский центр мониторинга качества образования», 2013. 768 с. (Серия «Современная прикладная математика и информатика»).
- Занин К.А. Методы проектирования оптико-электронных комплексов космических аппаратов // Проектирование автоматических космических аппаратов для фундаментальных научных исследований. Т. 1. М.: МАИ, 2013. С. 261–335.
- Григорьев А.Н., Алтухов А.И., Коршунов Д.С. Подход к ведению аэросъемки местности с использованием компоновки оптикоэлектронных камер // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2020. Т. 20. № 3. С. 318– 326. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2020-20-3-318-326
- Карасик В.Е., Орлов В.М. Локационные лазерные системы видения. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2013. 478 с.

применение результаты моделирования найдут в задаче прогнозирования качества изображений [1, 9, 14, 16, 17], полученных с использованием искусственных источников оптической подсветки.

Заключение

В работе представлен подход к моделированию светосигнальных характеристик — спектральной плотности потока излучения и энергетической освещенности земной поверхности. Указанные характеристики учитывают местоположение и время съемки средствами дистанционного зондирования Земли освещаемой точки.

На практике светосигнальные характеристики используются для обоснования выбора режимов работы излучающей аппаратуры оптико-электронных комплексов с учетом естественных условий освещенности земной поверхности. В частности, на основе оценок сделан вывод о необходимости искусственного усиления спектральной плотности потока излучения в заданном диапазоне спектра. Цель такого усиления — достижение требуемой освещенности снимаемого участка земной поверхности на конкретные дату и время. Усиление спектральной плотности потока излучения позволяет создать экспозицию, требуемую для формирования изображений.

Достоинством предложенного подхода является возможность получения снимков, характеризуемых высоким значением линейного разрешения на местности, не прибегая к повышению времени накопления заряда фотоприемного устройства, что особенно актуально в условиях ведения аэрокосмической съемки.

References

- 1. Baklanov A.I. Observation and Monitoring Systems. Moscow, BINOM Publ., 2009, 234 p. (in Russian)
- Yurchenko V.I. Design peculiarities of the aerial photography from an unmanned aircraft. *Vestnik of the Siberian State University* of Geosystems and Technologies (SSUGT), 2021, vol. 26, no 2. pp. 65–81. (in Russian). https://doi.org/10.33764/2411-1759-2021-26-2-65-81
- Emelyanov S.G., Atakishev O.I., Altuchov A.I., Gnusarev N.V., Korshunov D.S. On accounting lighting conditions to survey space objects photographic means. *Proceedings of Southwest State University*, 2012, no. 3-1(42), pp. 58–62. (in Russian)
- Khrushch R.M. Aerospace Methods. Part 1. Aerial and Satellite Surveys and a Single Still Photograph Theory. St. Petersburg, Saint Petersburg State University Publ., 2009, 160 p. (in Russian)
- 5. Moiseev V.S. *Applied Command and Control Theory for Unmanned Aerial Vehicles*. Kazan, Republican center for monitoring the quality of education, 2013, 768 p. (in Russian)
- Zanin K.A. Methods for designing optical-electronic complexes of space vehicles. *Design of automatic space vehicles for fundamental scientific research*. Moscow, MAI Publ., 2012, pp. 261–335. (in Russian)
- Grigor'ev A.N., Altukhov A.I., Korshunov D.S. Aerial mapping based on arrangement of optical electron cameras. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2020, vol. 20, no. 3, pp. 318–326. (in Russian). https://doi. org/10.17586/2226-1494-2020-20-3-318-326
- 8. Karasik V.E., Orlov V.M. *Location-Based Laser Vision Systems*. Moscow, BMSTU Publ., 2013, 478 p. (in Russian)
- 9. Grigor'ev A.N., Altuchov A.I., Korshunov D.S. Approach to getting images of objects based on indirect laser location data. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and*

- Григорьев А.Н., Алтухов А.И., Коршунов Д.С. Подход к получению изображений объектов на основе данных непрямой лазерной локации // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2021. Т. 21. № 1. С. 31–39. https:// doi.org/10.17586/2226-1494-2021-21-1-31-39
- Gariepy G., Krstajic N., Henderson R., Li C., Thomson R.R., Buller G.S., Heshmat B., Raskar R., Leach J., Faccio D. Singlephoton sensitive light-in-fight imaging // Nature Communications. 2015. V. 6. P. 6021. https://doi.org/10.1038/ncomms7021
- Тихонов Е.В., Маркушин Г.Н., Кошелев А.В., Векшин Ю.А., Алмазов А.А., Швалев А.В., Коротаев В.В. Параметрический лазерный дальномер с пассивной системой термостабилизации // Оптический журнал. 2023. Т. 90. № 10. С. 80–92. http://doi. org/10.17586/1023-5086-2023-90-10-80-92
- Григорьев А.Н., Замарин А.И., Караваев М.Н. Метод формирования групповых объектов для космических средств дистанционного зондирования Земли // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2015. Т. 15. № 4. С. 587–594. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2015-15-4-587-594
- Молчанов А.С. Чаусов Е.В. Методика оценивания линейного разрешения авиационных цифровых оптико-электронных систем в процессе летных испытаний // Известия Тульского государственного университета. Технические науки. 2019. № 2. С. 140– 150.
- Григорьев А.Н., Коршунов Д.С., Беляев А.С. Прогнозирование качества гиперспектральных снимков космических систем дистанционного зондирования // Труды Военно-космической академии им. А.Ф. Можайского. 2010. № 629. С. 143–147.
- 15. Демин А.В., Моисеева М.И. Инвариантная модель для оценки коэффициента пропускания атмосферы при мониторинге объектов в оптическом диапазоне спектра // Научно-технический вестник Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики. 2012. № 1. С. 9–14.
- Маркушин Г.Н., Коротаев В.В., Кошелев А.В., Самохина И.А., Васильев А.С., Тимофеев А.Н., Васильева А.В., Ярышев С.Н. Двухдиапазонные оптико-электронные системы обнаружения субъектов браконьерского промысла // Оптический журнал. 2022. Т. 89. № 9. С. 36–48. http://doi.org/10.17586/1023-5086-2022-89-09-36-48
- Злобин В.К., Еремеев В.В. Обработка аэрокосмических изображений. М.: Физматлит, 2006. 288 с.

Авторы

Алтухов Александр Иванович — кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация, SC 57217053398, https://orcid.org/0000-0002-4105-0296, aai_51@mail.ru Коршунов Денис Сергеевич — кандидат технических наук, доцент, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация, SC 57195312804, https:// orcid.org/0000-0001-6344-2533, korshunov.denis@rambler.ru

Статья поступила в редакцию 13.10.2023 Одобрена после рецензирования 01.11.2023 Принята к печати 26.11.2023 Optics, 2021, vol. 21, no. 1, pp. 31-39 (in Russian). https://doi. org/10.17586/2226-1494-2021-21-1-31-39

- Gariepy G., Krstajic N., Henderson R., Li C., Thomson R.R., Buller G.S., Heshmat B., Raskar R., Leach J., Faccio D. Singlephoton sensitive light-in-fight imaging. *Nature Communications*, 2015, vol. 6, pp. 6021. https://doi.org/10.1038/ncomms7021
- Tikhonov E.V., Markushin G.N., Koshelev A.V., Vekshin Yu.A., Almazov A.A., Shvalev A.V., Korotaev V.V. Parametric laser rangefinder with passive system of thermostabilization. *Opticheskii Zhurnal*, 2023, vol. 90, no. 10, pp. 80–92. (in Russian). http://doi. org/10.17586/1023-5086-2023-90-10-80-92
- Grigoriev A.N., Zamarin A.I., Karavaev M. N. Method of group objects forming for space-based remote sensing of the Earth. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies*, *Mechanics and Optics*, 2015, vol. 15, no. 4, pp. 587–594. (in Russian)
- Molchanov A.S., Chausov E.V. Method of estimating a linear solution aviation digital optico-electronic systems during flight testing process. *Izvestiya Tula State University. Technical Sciences*, 2019, no. 2, pp. 140–150. (in Russian)
- Grigorev A.N., Korshunov D.S., Beliaev A.S. Quality prediction of the hyperspectral images of remote sensing space systems. *Proceedings of the Mozhaisky Military Space Academy*, 2010, no. 629, pp. 143–147. (in Russian)
- Demin A., Moiseeva M. Invariant model for estimation of the atmosphere transmitting efficiency at objects monitoring in the optical spectral range. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2012, no. 1, pp. 9–14. (in Russian)
- Markushin G.N., Korotaev V.V., Koshelev A.V., Samokhina I.A., Vasilev A.S., Timofeev A.N., Vasileva A.V., Yaryshev S.N. Dual-band optoelectronic poaching detection systems. *Journal of Optical Technology*, 2022, vol. 89, no. 9, pp. 528–536. https://doi.org/10.1364/ JOT.89.000528
- 17. Zlobin V.K., Eremeev V.V. *Aerospace Imaging Processing*. Moscow, Fizmatlit Publ., 2006, 288 p. (in Russian)

Authors

Alexander I. Altuchov — PhD, Associate Professor, Head of Department, Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation, sc 57217053398, https://orcid.org/0000-0002-4105-0296, aai_51@mail.ru

Denis S. Korshunov — PhD, Associate Professor, Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation, SC 57195312804, https://orcid.org/0000-0001-6344-2533, korshunov. denis@rambler.ru

Received 13.10.2023 Approved after reviewing 01.11.2023 Accepted 26.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

I/İTMO

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

NHOOPMAUNOHHIJX TEXHONOFNÄ, MEXAHNKN N ONTUKN

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1084-1095 УДК 535.8

Люминесцентная динамика кислородного окисления *Viburnum opulus L.* в растворах хитозана с наночастицами золота

Анна Владимировна Цибульникова¹, Евгения Сергеевна Землякова²⊠, Дмитрий Александрович Артамонов³, Василий Анатольевич Слежкин⁴, Илья Геннадьевич Самусев⁵, Андрей Юрьевич Зюбин⁶, Валерий Вениаминович Брюханов⁷

1,2,3,4,5,6,7 Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация

^{2,4} Калининградский государственный технический университет, Калининград, 236022, Российская Федерация

¹ memorgold@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8578-0701

² evgeniya.zemljakova@klgtu.ru^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-0974-3914

³ euroset2016ig98@icloud.com, https://orcid.org/0000-0003-2141-8900

⁴ vasiliy.slezhkin@klgtu.ru, https://orcid.org/0000-0002-2801-7029

⁵ is.cranz@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510

⁶ azubin@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408

⁷ Bryukhanov_v.v@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4689-7207

Аннотация

Введение. Представлены результаты исследования люминесцентной динамики комбинированных водноспиртовых растворов экстрактов плодов калины красной (Viburnum opulus L.) с хитозаном и наночастицами золота при разных концентрациях кислорода. Поиск природных источников фотосенсибилизаторов является актуальной задачей. Для решения данной задачи используются чувствительные аналитические методы, например люминесцентные, с усилением аналитического сигнала в результате генерации плазмонов в наночастицах благородных металлов. Дополнительные исследования в условиях генерации плазмонной энергии показали существенные изменения в динамике оптических спектров при вариации концентрации кислорода в растворах. Спектрально-временная динамика исследована при полном окислении витамина С в изучаемой системе. Метод. Основным методом регистрации динамики взаимодействия флавоноидов Viburnum opulus L. с молекулами кислорода выбран люминесцентный метод. Спектры люминесценции измерены на установке Fluorolog-3 (Horiba, Япония). Применены методы абсорбционного анализа на спектрофотометре (Shimadzu, Япония). Время жизни люминесценции экстрактов Viburnum opulus L. в наносекундном диапазоне измерено в режиме многоканального счета фотонов с использованием пикосекундного диода NanoLED-405L на спектральной установке Fluorolog-3. Выполнена регистрация времени жизни исследуемых экстрактов в микросекундном диапазоне при возбуждении импульсной ксеноновой лампой. Синтез наночастиц золота проведен методом лазерной абляции металлической пластины золота в дистиллированной воде. Лазерная абляция выполнена на установке LQ929 (Solar Laser System, Республика Беларусь). Основные результаты. Обнаружен плазмонный эффект усиления оптической плотности поглощения и интенсивности люминесценции. Изучена кинетика тушения люминесценции экстракта плодов Viburnum opulus L. с хитозаном под влиянием наночастиц золота, близкая к диффузионной. Спектрально определена концентрация кислорода, при которой происходит окисление флавоноидов экстракта. В условиях изменения концентрации кислорода установлены зависимости изменения интенсивности люминесценции экстракта с хитозаном на длинах волн регистрации спектров люминесценции. При допировании кислорода во все растворы обнаружены и исследованы спектральные и кинетические особенности затухания люминесценции с максимумами на длинах волн 480 нм и 580 нм. Установлено, что время жизни люминесценции на длине волны регистрации 480 нм изменяется в зависимости от концентраций наночастиц золота и молекул кислорода и находится в наносекундной области спектра (3-4 нс). Показано, что люминесценция на длине волны 580 нм обусловлена окисленной формой кверцетина, входящего в состав флавоноидов Viburnum opulus L., возникшей при высоких концентрациях кислорода. Зарегистрирована долговременная хемилюминесценция на длине волны

[©] Цибульникова А.В., Землякова Е.С., Артамонов Д.А., Слежкин В.А., Самусев И.Г., Зюбин А.Ю., Брюханов В.В., 2023

580 нм с длительностью 15 мкс как результат радикальных процессов с участием молекулярного кислорода и молекул экстракта. **Обсуждение.** Представленные в работе спектральные методы, а также способ определения кверцетина в результате кислородного окисления флавоноидов *Viburnum opulus L*. могут быть использованы в областях биофизики, биотехнологий и химического анализа.

Ключевые слова

спектры поглощения, Viburnum opulus L., хитозан, наночастицы золота, окисление, времена жизни люминесценции

Благодарности

Исследование выполнено в рамках Федерального проекта Государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № FZWM-2020-0003 «Поиск новых материалов и методов плазмо- и фототерапии онкологических заболеваний, дерматитов и септических осложнений»).

Ссылка для цитирования: Цибульникова А.В., Землякова Е.С., Артамонов Д.А., Слежкин В.А., Самусев И.Г., Зюбин А.Ю., Брюханов В.В. Люминесцентная динамика кислородного окисления *Viburnum opulus L*. в растворах хитозана с наночастицами золота // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1084–1095. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1084-1095

Luminescent dynamics of oxygen oxidation of *Viburnum opulus L*. in chitosan solutions with gold nanoparticles

Anna V. Tsibulnikova¹, Evgeniya S. Zemlyakova^{2⊠}, Dmitry A. Artamonov³, Vasily A. Slezhkin⁴, Ilia G. Samusev⁵, Andrey Yu. Zubin⁶, Valery V. Bryukhanov⁷

1.2.3,4,5,6,7 Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation 2.4 Kaliningrad State Technical University, Kaliningrad, 236022, Russian Federation

¹ memorgold@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8578-0701

² evgeniya.zemljakova@klgtu.ru^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-0974-3914

³ euroset2016ig98@icloud.com, https://orcid.org/0000-0003-2141-8900

⁴ vasiliy.slezhkin@klgtu.ru, https://orcid.org/0000-0002-2801-7029

⁵ is.cranz@gmail.com, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510

⁶ azubin@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408

⁷ Bryukhanov v.v@mail.ru, https://orcid.org/0000-0003-4689-7207

Abstract

The results of a study of the luminescent dynamics of combined aqueous-alcoholic solutions of extracts of red viburnum (Viburnum opulus L.) fruits with chitosan and gold nanoparticles at different oxygen concentrations were presented. The search for natural sources of photosensitizers is an urgent task. The sensitive analytical methods, in particular luminescence, with amplification of the analytical signal as a result of the generation of plasmons in nanoparticles of noble metals, have been used in this work. An additional studies under the conditions of plasmon energy generation showed a significant changes in the dynamics of optical spectra with variations in oxygen concentration in solutions. The spectral-temporal dynamics was investigated with complete oxidation of vitamin C in the studied system. The main method for recording the dynamics of interaction of Viburnum opulus L. flavonoids with oxygen molecules is the luminescent method. Luminescence spectra were measured by means of Fluorolog-3 optical system (Horiba, Japan). Methods of absorption analysis (Shimadzu spectrophotometer, Japan) were also used in the work. The nanosecond luminescence lifetimes of the extracts were measured in the multichannel photon counting mode using a picosecond NanoLED-405L nanoled by means of Fluorolog-3 spectral setup. Microsecond lifetimes were recorded when excited by a pulsed Xe lamp. For the synthesis of gold nanoparticles, the method of laser ablation of a metal plate of gold in distilled water was used. Laser ablation was performed at the LQ929 installation of Solar Laser System (Belarus). A plasmonic effect of amplification of the optical absorption density and luminescence intensity was detected. The kinetics of luminescence quenching of Viburnum opulus L. extract with chitosan under the influence of gold nanoparticles, close to diffusion, was studied. The oxygen concentration at which the flavonoids of the extract are oxidized was spectrally determined. Under the oxygen concentration changing, the dependences of changes in the luminescence intensity of the extract with chitosan at the wavelengths of registration of luminescence spectra were established. When oxygen was doped into all solutions, the spectral and kinetic features of luminescence attenuation with maxima at wavelengths of 480 and 580 nm were detected and investigated. It was established that the lifetime of luminescence at a registration wavelength of $\lambda = 480$ nm varies depending on the concentration of gold nanoparticles and the concentration of oxygen molecules and it is the nanosecond spectral region (3-4 ns). It was shown that luminescence at a wavelength of 580 nm is due to the oxidized form of quercetin which is a part of the Viburnum opulus L. flavonoids, appeared at a high oxygen concentrations. Long-lived chemiluminescence at a wavelength of 580 nm with time decay of 15 µs as a result of radical processes involving molecular oxygen and extract molecules was recorded. The spectral methods presented in this paper, as well as a method for determining of quercetin as a result of oxygen oxidation of flavonoids of red viburnum fruits, can be used in the field of biophysics, biotechnology and chemical analysis.

Keywords

absorption spectra, Viburnum opulus L., chitosan, gold nanoparticles, oxidation, luminescence lifetimes

Acknowledgements

The presented study was carried out within the framework of the Federal Project of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Project No. FZWM-2020-0003 "Research of new materials and methods of plasma and phototherapy of oncological diseases, dermatitis and septic complications").

For citation: Tsibulnikova A.V., Zemlyakova E.S., Artamonov D.A., Slezhkin V.A., Samusev I.G., Zubin A.Yu., Bryukhanov V.V. Luminescent dynamics of oxygen oxidation of *Viburnum opulus L*. in chitosan solutions with gold nanoparticles. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1084–1095 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1084-1095

Введение

В последние годы противоопухолевая активность природных соединений, выделенных из растительного сырья, стала предметом активных медико-биологических исследований. Так, например, в качестве средства борьбы против злокачественных образований, воспалительных процессов часто выступают экстракты растений [1–3].

Полифенолы и флавоноиды привлекают значительное внимание из-за их проапоптотических способностей и участия в миграции и ингибировании процессов метастазирования [4]. Установлено противораковое действие полифенольных соединений экстрактов плодов калины красной (Viburnum opulus L., VO) в отношении клеточных линий рака молочной железы (MCF-7) и шейки матки (HeLa) человека [5], а также для лечения других гинекологических заболеваний [6]. Польза VO для здоровья человека заключается в наличии таких биологически активных компонентов как аскорбиновая кислота, каротиноиды, иридоиды, эфирные масла и фенольные соединения [7-11]. Одним из научно-практических методов изучения биологических объектов, обработанных полифенолами и аминокислотами, является, например, оптимизация лечения и регенерации повреждений кожи и мягких тканей с использованием биополимеров. Особое внимание уделяется материалам на основе хитозана, обладающего высокой биосовместимостью, биодеградируемостью [12, 13] и антибактериальными свойствами [14, 15]. Хитозан используют как стабилизатор молекулярных и неорганических наноструктурных систем [16, 17] и как материал для доставки лекарственных форм, в качестве антибактериальных гидрогелей и подложек для регенеративной медицины и т. д. [18-21].

Другое важное направление биомедицинских исследований хитозана — комбинированное использование препаратов хитозана с наночастицами золота. Такие комплексы показали их ранозаживляющую активность, регенерирующие и бактерицидные свойства, что делает их перспективными при использовании для лечения, например, гнойно-воспалительных осложнений в составе раневых покрытий [22, 23]. Существуют исследования, подтверждающие синергетический эффект от комбинированного влияния хитозана и наночастиц металлов [24–27]. Изучена также биохимическая и фотобиологическая эффективность комплексов, содержащих хитозан и природные биологически активные вещества [16, 28–32].

Известно, что наиболее чувствительными аналитическими методами являются люминесцентные, в том числе с использованием процессов усиления в результате генерации плазмонов в наночастицах благородных металлов — серебра и золота [33] и флавоноидов (кверцетин, морин, таурин, мурецетин и др.) экстрактов растений [34], в том числе и в окисленной форме [35] при различных температурах [36]. Все научные спектральные данные приводятся о растительных экстрактах и препаратах флавоноидов в основном в многокомпонентных растворах [37]. Однако спектрально-кинетические особенности фотофизических процессов флавоноидов в условиях повышенных концентраций молекулярного кислорода в растворах с наночастицами золота малоизучены.

Цель настоящей работы — изучение спектрально-люминесцентных процессов экстрактов плодов VO в водно-спиртовой среде с хитозаном и наночастицами золота при высоких концентрациях растворенного кислорода. При этом необходимо исследовать динамику процессов окисления флавоноидов (рутин и кверцетин) в составе VO на основании люминесцентных данных и оценить возможность генерации активных форм кислорода.

Настоящая работа является продолжением работ по исследованию фотосенсибилизаторов на основе растительных экстрактов, их активации в результате кислородонасыщения и формированию люминесцентных активных микроэмульсионных комплексов с переносом электромагнитной энергии при участии наночастиц благородных металлов [38–41].

Методика проведения эксперимента и подготовки образцов

Спектральные измерения. Спектры флуоресценции экстрактов измерены на установке Fluorolog-3 (Ногіва, Япония). Для регистрации короткоживущих состояний использован твердотельный импульсный диод NanoLED-405L с длительностью импульса 200 пс. Для регистрации долгоживущих (триплетных) состояний использована импульсная ксеноновая лампа, которая работает в следующем режиме: длительность импульса $\tau = 0,001$ мс, количество импульсов в секунду N = 120, временная задержка после пачки импульсов 0,01 мс.

Определение концентрации аскорбиновой кислоты в растворе экстракта. Определение количества аскорбиновой кислоты выполнено с использованием метода йодатометрии, основанного на процессе окисления аскорбиновой кислоты в растворе экстракта плодов VO йодом в присутствии индикатора — крахмала до неисчезающего синего окрашивания. Полученная концентрация аскорбиновой кислоты составила $C = 6,3 \cdot 10^{-3}$ моль/л. Для приготовления раствора на основе хитозана с наночастицами золота использован объем экстракта равный 2 мл с концентрацией аскорбиновой кислоты.

Приготовление водно-спиртового экстракта ягод калины. Свежие плоды VO массой 213 г были измельчены в ступке и полученная масса отжата. К полученному соку добавлено равное количество водно-этанольного раствора в соотношении этанола и дистиллированной воды 3:7, далее экстракцию вели в течение 48 ч при комнатной температуре. Полученный экстракт неоднократно был пропущен через бумажные фильтры до получения прозрачной жидкости ярко-красного цвета, из которой после отстаивания в течение 24 ч не выпадал осадок. Подробная методика приготовления экстракта представлена в работе [38].

Приготовление наночастиц золота. Наночастицы получены методом наносекундной лазерной абляции золотой пластины в дистиллированной воде на установке LQ929 (Solar Laser System, Республика Беларусь), работающей в режиме модуляции добротности при следующих параметрах лазерного излучения: длина волны 532 нм, длительность импульса 10 нс, частота 15 Гц, энергия импульса 20 мкДж. Время одного сеанса абляции составило 5 мин, а объем раствора за один сеанс абляции — 1,2 мл. После процесса абляции раствор приобрел розовый цвет. Распределение наночастиц золота по их размерам исследовано методом динамического рассеянного света с использованием установки Photocor-Compact-Z. В результате средний гидродинамический радиус наночастиц золота составил примерно 40 нм, а измерение дзета-потенциала составило — 15,65 мВ.

Приготовление биополимерного раствора хитозана на основе VO с наночастицами золота. В работе использован промышленный хитозан (ООО «Биопрогресс», Россия) с молярной массой 87 кг/моль и степенью деацетилирования 83 %. Раствор содержал до 2 % хитозана в 2 % растворе щавелевой кислоты. Обозначим данную концентрацию хитозана в растворе кислоты за C_0 . Приготовлен с использованием магнитной мешалки при 1000 об/мин. Уровень кислотности раствора составил примерно 3,5. Эталонный раствор экстракта VO с хитозаном был приготовлен следующим образом: VO смешан с раствором хитозана в соотношении 1:1 с добавлением 0,5 мл дистиллированной воды. Концентрация наночастиц золота в исследуемых растворах варьировалась в диапазоне $C = (0,1-1,0) \cdot 10^{-9}$ моль/л.

Результаты исследования

В первой серии экспериментов выполнено исследование влияния концентраций хитозана ($C_0 = 2,0$ %, $0,1C_0 = 0,2$ % и $0,2C_0 = 0,4$ %) и наночастиц золота (0,1-1,0) 10-9 моль/л на спектральные свойства поглощения экстракта VO в видимом диапазоне. Из рис. 1, а видно, что при малых концентрациях хитозана оптическая плотность в ультрафиолетовой области спектра имеет следующие значения: D = 2,5 для концентрации 0,2 % и *D* = 4,0 для — 0,4 %. При этом в видимой области спектра на длине волны поглощения экстракта VO (520 нм) при данных концентрациях хитозана происходит уменьшение оптической плотности. Максимальное значение оптической плотности D = 0,9 получено на длине волны 520 нм, что соответствует исходной концентрации хитозана 2,0 %. Отметим, что в дальнейших фотофизических экспериментах с растворами VO и хитозана, а также с кислородонасыщенными растворами была выявлена стабилизирующая особенность хитозана. Например, при концентрации до 2,0 % хитозан является стабилизатором и полученные растворы можно использовать до трех суток, что характерно именно для хитозана [16, 17]. Все дальнейшие эксперименты с VO выполнены в присутствии различных концентраций наночастиц золота.



Рис. 1. Экспериментальные спектры поглощения экстракта *VO* в растворе хитозана концентрацией: 2,0 %, 0,4 % и 0,2 % в видимой области спектра (*a*) и 2,0 % с наночастицами золота ($C_1 = 1,0\cdot 10^{-9}$, $C_2 = 0,75\cdot 10^{-9}$, $C_3 = 0,5\cdot 10^{-9}$, $C_4 = 0,25\cdot 10^{-9}$, $C_5 = 0,1\cdot 10^{-9}$ моль/л) (*b*). На вставке показан спектр поглощения раствора наночастиц золота с концентрацией $C_1 = 1,0\cdot 10^{-9}$ моль/л. XT3 — хитозан; НЧ Аи — наночастицы золота

Fig. 1. Experimental absorption spectra of *VO* extract in chitosan solution of various concentrations: 2.0 %, 0.4 % and 0.2 % in the visible spectral region (*a*) and absorption spectra of *VO* in chitosan solution (2.0 %) with gold nanoparticles ($C_1 = 1.0 \cdot 10^{-9}$, $C_2 = 0.75 \cdot 10^{-9}$, $C_3 = 0.5 \cdot 10^{-9}$, $C_4 = 0.25 \cdot 10^{-9}$, $C_5 = 0.1 \cdot 10^{-9}$ mol/l) (*b*). Insert — the absorption spectrum of the gold nanoparticles solution concentration of $C_1 = 1.0 \cdot 10^{-9}$ mol/l

На рис. 1, *b* заметно, что оптическая плотность экстракта *VO* с ростом концентрации наночастиц золота в хитозане возрастает. В работе [38] получено увеличение оптической плотности молекул экстракта *VO* в растворе в присутствии наночастиц золота. Следовательно, в растворах *VO* с хитозаном при оптическом возбуждении длинами волн в диапазоне 400–405 нм также происходит возбуждение плазмонов наночастиц золота, в результате чего происходит диполь-дипольный перенос электронной энергии между взаимодействующими частицами с увеличением оптической плотности поглощения (рис. 1, *b*) [40]. В [42–44] установлено, что максимумы поглощения в спектре экстракта соответствуют соединениям кверцетина (380 и 415 нм) и цианидина (525 нм).

Рассмотрим люминесцентные свойства флавоноидов, в частности, кверцетина в экстракте VO с наночастицами золота в биополимерном растворе хитозана (рис. 2).

Анализ зависимостей отношений люминесценции I/I_0 (I_0 и I — интенсивности люминесценции без и с наночастицами золота) растворов VO от концентрации наночастиц золота $C = (0,1-1) \cdot 10^{-9}$ моль/л в хитозане показал, что наблюдается тушение люминесценции VO на длине волны 460 нм по закону Штерна-Фольмера с константой скорости тушения равной $Kq = 2,8 \cdot 10^8$ моль⁻¹ лс⁻¹ (рис. 2, b). Таким образом, константа скорости тушения наночастиц золота люминесценции молекул VO в растворе хитозана ограничена диффузионной константой тушения в воде (10^9 моль⁻¹ л), что указывает на влияние вязкостных свойств раствора. Кроме того, на длине волны 660 нм наблюдается увеличение интенсивности люминесценции растворов в 3,2 раза, что будет рассмотрено далее.

Выполним спектрально-кинетические исследования комплексов *VO* с хитозаном и наночастицами золота при разных концентрациях молекулярного кислорода.

Исследуем влияние молекул кислорода в комплексе с экстрактом VO без наночастиц золота (рис. 3). Фотовозбуждение осуществим стационарным источ-



В работах [43, 44] установлено, что люминесцирующим соединением экстракта VO является кверцитин. Также в состав исследуемого экстракта VO входит целый ряд других биологически активных веществ, одним из которых является ингибитор окислительных процессов, антиоксидант — аскорбиновая кислота и ее соли. Концентрация аскорбиновой кислоты в составе экстракта VO составила $5,6\cdot10^{-3}$ моль/л. По причине наличия аскорбиновой кислоты в составе VO кверцитин не сразу окислялся в водных и спиртовых растворах кислородом воздуха.

В результате установлено, что полное окисление аскорбиновой кислоты в растворе VO с хитозаном происходило после 10 мин интенсивного кислородонасыщения. В первые 10 мин кислород активно окислял аскорбиновую кислоту и подобные ей структуры и не оказывал влияние на люминесцирующие соединения — кверцитин и цианидин. Спустя 15 мин (при $C = 25 \cdot 10^{-3}$ моль) в спектре начал формироваться новый максимум свечения люминесценции на длине волны 580 нм (рис. 3, а). Значение содержания аскорбиновой кислоты в этом случае можно считать минимальным и начальным для дальнейших измерений концентрационного влияния молекулярного кислорода в эксперименте. При этом заметим, что добавление хитозана в раствор с экстрактом VO увеличил в целом антиоксидантные свойства VO [45].

При росте концентрации кислорода в растворе VO с хитозаном до $C_4[O_2] = 25 \cdot 10^{-3}$ моль наблюдалось увеличение интенсивности свечения люминесценции на длинах волн 480, 580 и 660 нм при стационарном



Рис. 2. Спектры люминесценции *VO* с концентрациями наночастиц золота: $C_1 = 1 \cdot 10^{-9}$, $C_2 = 0.75 \cdot 10^{-9}$, $C_3 = 0.5 \cdot 10^{-9}$, $C_4 = 0.25 \cdot 10^{-9}$, $C_5 = 0.1 \cdot 10^{-9}$ моль/л в растворе хитозана C = 2.0 % (*a*); концентрационная зависимость Штерна–Фольмера (*b*)

Fig. 2. Luminescence spectra of *VO* with gold nanoparticles concentration of: $C_1 = 1 \cdot 10^{-9}$, $C_2 = 0.75 \cdot 10^{-9}$, $C_3 = 0.5 \cdot 10^{-9}$, $C_4 = 0.25 \cdot 10^{-9}$, $C_5 = 0.1 \cdot 10^{-9}$ mol/l in chitosan solution C = 2.0 % (*a*); Stern-Vollmer concentration dependence (*b*)



Рис. 3. Динамика спектров люминесценции экстрактов *VO* с хитозаном концентрацией 2,0 % без наночастиц золота с кислородом концентраций: $C_1[O_2] = 3 \cdot 10^{-3}$, $C_2[O_2] = 6 \cdot 10^{-3}$, $C_3[O_2] = 12 \cdot 10^{-3}$, $C_4[O_2] = 25 \cdot 10^{-3}$, $C_5[O_2] = 52 \cdot 10^{-3}$ моль (*a*); функции изменения интенсивностей (*I*/*I*₀) люминесценции экстрактов *VO* с хитозаном (2,0 %) без наночастиц золота на различных длинах волн регистрации максимума свечения от концентрации кислорода (*b*). Длина волны стационарного фотовозбуждения равна 400 нм

Fig. 3. Dynamics of luminescence spectra of *VO* extracts with chitosan concentration of 2.0 % without gold nanoparticles with oxygen of various concentrations: $C_1[O_2] = 3 \cdot 10^{-3}$, $C_2[O_2] = 6 \cdot 10^{-3}$, $C_3[O_2] = 12 \cdot 10^{-3}$, $C_4[O_2] = 25 \cdot 10^{-3}$, $C_5[O_2] = 52 \cdot 10^{-3}$ mol (*a*). The functions of changing the intensities (*I*/*I*₀) of *VO* luminescence with chitosan (2.0 %) without gold nanoparticles at different wavelengths of the maximum luminescence registration vs. oxygen concentration (*b*). The wavelength of stationary photoexcitation is 400 nm

фотовозбуждении, максимумы которых представлены на графиках рис. 3, *b*. Например, из рис. 3, *b* видно, что на длине волны 580 нм происходит линейный рост интенсивности люминесценции и опережает рост на 480 нм. При этом для интенсивности свечения люминесценции на 660 нм наблюдается нелинейный рост люминесценции от концентрации кислорода. Данный результат указывает на фотофизическое различие процессов свечения люминесценции экстрактов VO, и полученная разница увеличивается при добавлении в растворы экстрактов VO наночастиц золота.

На рис. 4 показана динамика интенсивностей свечения люминесценции экстрактов *VO* в растворах хитозана в присутствии наночастиц золота от концентрации кислорода при фотовозбуждении стационарным источником ($\lambda = 400$ нм).



Рис. 4. Динамика спектров люминесценции экстрактов VO с хитозаном с постоянной концентрацией наночастиц золота (C₁ = 1·10⁻⁹ моль/л) в присутствии молекул кислорода (C₁[O₂] = 10⁻³, C₂[O₂] = 6·10⁻³, C₃[O₂] = 12·10⁻³, C₄[O₂] = 25·10⁻³ моль) (*a*); функции I/I₀ интенсивности люминесценции экстрактов VO с хитозаном и наночастицами золота на различных длинах волн регистрации 480, 580 и 660 нм от концентрации кислорода (*b*). Длина волны стационарного фотовозбуждения растворов равна 400 нм

Fig. 4. Dynamics of luminescence spectra of *VO* extracts with chitosan with a constant concentration of gold nanoparticles $(C_1 = 1 \cdot 10^{-9} \text{ mol/l})$ in the presence of oxygen molecules $(C_1[O_2] = 10^{-3}, C_2[O_2] = 6 \cdot 10^{-3}, C_3[O_2] = 12 \cdot 10^{-3}, C_4[O_2] = 25 \cdot 10^{-3} \text{ mol})$ (*a*); Functions *I/I*₀ of the luminescence intensity of *VO* extracts with chitosan and gold nanoparticles at different recording wavelengths 480, 580 and 660 nm vs. oxygen concentration (*b*). The wavelength of stationary photoexcitation of solutions is 400 nm

Сравнение результатов динамики люминесценции экстрактов VO с и без наночастиц золота (рис. 3 и рис. 4) от концентрации кислорода показало, что спектральные особенности (положение максимумов, полуширина спектральных полос, увеличение интенсивности свечения от концентрации кислорода) примерно одинаковы. Однако в присутствии наночастиц золота в растворе VO с хитозаном формирование максимума на длине волны 580 нм наблюдается уже при концентрации кислорода $C_2[O_2] = 6 \cdot 10^{-3}$ моль. Таким образом, практически полное окисление аскорбиновой кислоты наблюдается через 4 мин. Отметим резкое увеличение интенсивности люминесценции основного максимума на длине волны 480 нм при максимальной концентрации кислорода ($C_4[O_2] = 25 \cdot 10^{-3}$ моль) в растворе хитозана в присутствии наночастиц золота, что может быть обусловлено плазмонным переносом электронной энергии в дипольных комплексах наночастиц золота с молекулами VO внутри хитозановой оболочки [40]. При этом процессы усиления интенсивности люминесценции от концентрации кислорода при наличии в растворах наночастиц золота становятся нелинейными (рис. 4, b).

С целью понимания физики процессов усиления интенсивности люминесценции в растворах VO под влиянием кислорода, в работе была исследована кинетика люминесценции указанных растворов на длинах волн регистрации люминесценции (480, 580, 670 нм) при возбуждении лазерным пикосекундным источником ($\tau = 0,2$ нс) и импульсной ксеноновой лампой длиной волны возбуждения 405 нм. Кинетические кривые затухания (рис. 5) были аппроксимированы одноэкспоненциальной моделью. Кинетика затухания короткоживущей люминесценции была измерена в режиме многоканального единичного счета фотонов.

Установлено, что кинетика люминесценции VO с хитозаном в отсутствие кислорода в растворе является однокомпонентной с длительностью люминесценции около 4 нс на длине волны 480 нм. Как видно из таблицы, значительные изменения кинетики затухания люминесценции растворов возникают при добавлении молекул кислорода в раствор VO с хитозаном до концентрации $O_2[C_4]$ (рис. 3, *a*). Так, появление в спектрах люминесценции дополнительного максимума свечения на длине 580 нм сопровождается наносекундной длительностью затухания $\tau_{580} = 3,22$ нс. Также, анализируя кинетику затухания люминесценции VO с хитозаном и наночастицами золота, видно, что спектральная кинетика люминесценции, остается на трех длинах волн -480 нм, 580 нм, 660 нм и становится двухкомпонентной (наносекундная и микросекундная временная дезактивации). С целью подтверждения этого вывода на рис. 5, b представлены кинетические кривые затухания люминесценции VO с хитозаном и наночастицами золота на длинах волн 480 нм и 580 нм.

При выявлении в регистрируемых спектрах двухкомпонентной кинетики затухания люминесценции (таблица) в исследованных растворах VO с хитозаном и наночастицами можно сделать следующие выводы. Вопервых, экспериментально не была зарегистрирована люминесценция чистого хитозана в водных растворах с его 2 %-ным содержанием при возбуждении излучением 400 нм. В настоящей работе хитозан был добавлен в раствор с VO в малых дозах, и только для химической стабилизации, его присутствие не повлияло на кинетику люминесценции. Во-вторых, поскольку в широких (400-700 нм) спектрах люминесценции растворов VO с хитозаном и наночастицами наблюдалось сильное спектральное перекрывание излучения различных процессов преобразования энергии (флуоресценция различной поляризации, фосфоресценция, хемилюминесценция, генерация синглетного кислорода), то поэтому сложно выявить двухэкспоненциальный закон дезактивации излучения за исключением случая люминесценции на длине волны 670 нм.



Рис. 5. Кинетика короткоживущей люминесценции *VO* с хитозаном и наночастицами золота в присутствии кислорода (O₂[C₄]) на длинах волн регистрации люминесценции с экспоненциальной аппроксимацией (красные кривые) (*a*); экспериментальные кинетические кривые затухания долгоживущей люминесценции с и без кислорода с одноэкспоненциальной аппроксимацией (пунктирные кривые) (*b*)

Fig. 5. Luminescence kinetics of *VO* with chitosan and gold nanoparticles in the presence of oxygen $(O_2[C_4])$ at registration wavelengths with exponential approximation (red curves) (*a*); experimental kinetic curves of long-lived luminescence decay with and without oxygen molecules with one-exponential approximation-dash curves (*b*)

Таблица. Значения времени жизни люминесценции растворов VO с хитозаном (XT3), наночастицами золота (HЧ Au) и кислородом (O₂)

Образец	Длина волны, нм					
	480	580	670	580	480	
VO/XT3	4,00 нс		0,45 нс			
$VO/XT3 + O_2[C_4]$	3,97 нс	3,22 нс	0,44 нс			
VO/XT3 + HЧ Au	4,00 нс	3,15 нс	0,41 нс	10,00 мкс	13,00 мкс	
$VO/XT3 + HH Au + O_2[C_4]$	4,11 нс	3,30 нс	0,44 нс	15,00 мкс	10,00 мкс	

Table. Luminescence lifetimes of VO solutions with chitosan, gold nanoparticles and oxygen (O₂)

Таким образом, исследования динамики люминесценции растворов VO с хитозаном, а также с и без наночастиц золота, выявили не только спектральные различия, но и кинетические. Следовательно, на длинах волн 480 и 580 нм были сформированы разные молекулярные объекты люминесценции при добавлении кислорода в растворы с VO. Поскольку спектральные изменения и увеличение интенсивности люминесценции растворов VO с хитозаном от концентрации кислорода и наночастиц золота происходят одновременно, то можно с большой вероятностью предположить, что получены различные окислительные процессы молекулярных форм флавоноидов в составе VO [37].

Для подтверждения полученного результата выполнены дополнительные спектральные исследования растворов кверцетина («Диам», Россия). В спектре водно-спиртового раствора кверцетина виден максимум в области 590 нм. Таким образом, содержание кверцетина в исследуемом экстракте спектрально проявился в люминесцентных спектрах с максимумом на длине волны около 580 нм, что не противоречит данным работы [46, 47]. Хромато-масс-спектрометрическая идентификация продуктов окисления кверцетина кислородом воздуха в водных растворах [47] также показала, что в природе существуют несколько его окисленных форм (флавандион и бензофуранон). Поскольку изученные спектры поглощения и люминесценции являются спектрально широкими (рис. 3, а), то возможно существование и нескольких окисленных форм кверцетина в исследуемой среде. Необходимо добавить, что при химическом окислении кверцетина кислородом воздуха основными факторами, влияющими на реализацию того или иного механизма процесса, являются состав растворителя и его кислотности. Отметим, что в настоящей работе было экспериментально показано, что используемый метод повышения концентрации кислорода в растворе VO не влияет на параметры раствора в величинах кислотности, которые могут приводить к изменению механизмов окисления кверцетина. Таким образом, несмотря на большое количество научных работ, посвященных изучению окисления кверцетина, четкой и единообразной картины его химических свойств еще нет. Потому установление механизмов окисления кверцетина в различных условиях и идентификация продуктов его метаболизма, несомненно, актуальны.

Обратим внимание на свечения растворов VO с хитозаном и наночастицами золота, которые были зарегистрированы в спектрах люминесценции на длине волны около 660 нм. Специально созданные в работе большие концентрации молекулярного кислорода в изучаемой системе при фотовозбуждении 400 нм, могли вызвать формирование люминесцирующих долгоживущих комплексов с молекулами экстракта VO и димолями кислорода. Люминесценция таких комплексов может проявляться в свечении на длинах волн 650–660 нм [38].

Заключение

Фотовозбуждение длиной волны 400 нм водно-этанольных экстрактов Viburnum opulus L., легированных наночастицами золота, стабилизированных хитозаном и насыщенных молекулярным кислородом, привело к люминесценции и хемилюминесценции в видимой области спектра. Обнаружено увеличение оптической плотности и интенсивности люминесценции при длинах волн 530 и 680 нм в полученных растворах. Причиной данного увеличения является генерация плазмонов в наночастицах золота с последующей диполь-дипольной передачей плазмонной энергии флавоноидным комплексам.

В растворе при возбуждении с 400 нм обнаружено уменьшение интенсивности люминесценции на 480 нм в соответствии с законом Штерна–Фольмера. Одновременно была изучена кинетика тушения люминесценции в таких комплексах при пикосекундном фотовозбуждении и определена постоянная скорость тушения люминесценции наночастицами золота, которая на порядок меньше константы диффузии в связи с присутствием хитозана в растворе.

При высоких концентрациях кислорода в растворе Viburnum Opulus L. с хитозаном обнаружено появление нового максимума люминесценции с интенсивной люминесценцией при длине волны около 580 нм и длительностью примерно 3 нс. Дополнительный спектрально-люминесцентный анализ показал, что максимум при длине волны около 580 нм обусловлен появлением окисленной формы кверцетина (флавандиона/бензофуранона). Кроме того, было обнаружено, что в растворах Viburnum Opulus L. при использовании хитозана и высокой концентрации молекул кислорода долгоживущая (около 15 мкс) хемилюминесценция также проявляется на длине волны 580 нм, что связано с присутствием радикалов, образующихся в процессе окисления кверцетина.

Литература

- Makhadmeh G.N., Abuelsamen A., Al-Akhras M-A.H., Aziz A.A. Silica nanoparticles encapsulated cichorium pumilum as a promising photosensitizer for osteosarcoma photodynamic therapy: In-vitro study // Photodiagnosis and Photodynamic Therapy. 2022. V. 38. P. 102801. https://doi.org/10.1016/j.pdpdt.2022.102801
- Chiode M.M.M., Colonello G.P., Kabadayan F., Silva J.D.S., Suffredini I.B., Saraceni C.H.C. Plant extract incorporated into glass ionomer cement as a photosensitizing agent for antimicrobial photodynamic therapy on Streptococcus mutans // Photodiagnosis and Photodynamic Therapy. 2022. V. 38. P. 102788. https://doi. org/10.1016/j.pdpdt.2022.102788
- Sarker M.A.R., Ahn Y.-H. Strategic insight into enhanced photocatalytic remediation of pharmaceutical contaminants using spherical CdO nanoparticles in visible light region // Chemosphere. 2023. V. 311. Part 1. P. 137040. https://doi.org/10.1016/j. chemosphere.2022.137040
- Huang W.H., Zhang Q.W., Yuan C.S., Wang C.Z., Li S.P., Zhou H.H. Chemical constituents of the plants from the genus Oplopanax // Chemistry & Biodiversity. 2014. V. 11. N 2. P. 181–196. https://doi. org/10.1002/cbdv.201200306
- Zakłos-Szyda M., Pawlik N. The influence of viburnum opulus polyphenolic compounds on metabolic activity and migration of hela and mcf cells // Acta Innovations. 2019. V. 31. P. 33–42. https://doi. org/10.32933/ActaInnovations.31.4
- Bina F., Soleymani S., Toliat T., Hajimahmoodi M., Tabarrai M., Abdollahi M., Rahimi R. Plant-derived medicines for treatment of endometriosis: A comprehensive review of molecular mechanisms // Pharmacological Research. 2019. V. 139. P. 76–90. https://doi. org/10.1016/j.phrs.2018.11.008
- Ozkan G., Kostka T., Dräger G., Capanoglu E., Esatbeyoglu T. Bioaccessibility and transportation of cranberrybush (Viburnum Opulus) phenolics: Effects of non-thermal processing and food matrix // Food Chemistry. 2022. V. 380. P. 132036. https://doi. org/10.1016/j.foodchem.2021.132036
- Kajszczak D., Zakłos-Szyda M., Podsędek A. Viburnum Opulus L.—A review of phytochemistry and biological effects // Nutrients. 2020. V. 12. N 11. P. 3398. https://doi.org/10.3390/nu12113398
- Khalaf M.Z., Hassan B.H., Shbar A.K., Naher F.H., Salman A.H., Jabo N.F. Current status of population density of mediterranean fruit fly (Ceratitis Capitata) in fruit orchards in Central Iraq // Journal of Agricultural Science and Technology. 2011. P. 773–777.
- Saltan G., Süntar I., Ozbilgin S., Ilhan M., Demirel M.A., Oz B.E., Keleş H., Akkol E.K. Viburnum opulus L.: A remedy for the treatment of endometriosis demonstrated by rat model of surgically-induced endometriosis // Journal of Ethnopharmacology. 2016. V. 193. P. 450– 455. https://doi.org/10.1016/j.jep.2016.09.029
- Петрова И.Б., Жогова А.А., Черкашин А.В., Эллер К.И., Раменская Г.В., Самылина И.А. Биологически активные вещества плодов калины обыкновенной // Химико-фармацевтический журнал. 2014. Т. 48. № 5. С. 32–39.
- Qiu S., Zhou S., Tan Y., Feng J., Bai Y., He J., Cao H., Che Q., Guo J., Su Z. Biodegradation and prospect of polysaccharide from crustaceans // Marine Drugs. 2022. V. 20. N 5. P. 310. https://doi. org/10.3390/md20050310
- Skryabin K.G., Mikhailova S.N. Chitosan: Collection of articles // Nuclear Physics. 2013. V. 13. P. 104–116.
- Shi Z., Neoh K.G., Kang E.T., Wang W. Antibacterial and Mechanical properties of bone cement impregnated with chitosan nanoparticles // Biomaterials. 2006. V. 27. N 11. P. 2440–2449. https://doi. org/10.1016/j.biomaterials.2005.11.036
- Fernandes J.C., Tavaria F.K., Soares J.C., Ramos Ó.S., João Monteiro M., Pintado M.E., Xavier Malcata F. Antimicrobial effects of chitosans and chitooligosaccharides, upon Staphylococcus aureus and Escherichia coli, in food model systems // Food Microbiology. 2008. V. 25. N 7. P. 922–928. https://doi.org/10.1016/j.fm.2008.05.003
- 16. Дыдыкина В.Н., Ерёмина Ю.Д, Корятин А.С., Смирнов В.П., Смирнова Л.А. Влияние наноструктурированных систем «хитозан-наночастицы золота», «Хитозан-пчелиный яд-наночастицы золота» на структуру и массу опухоли, перекисное окисление липидов и функциональное состояние крыс с опухолью РС-1 // Медицинский альманах. 2016. № 2(42). С. 133–137.
- Tyukova I.S., Safronov A.P., Kotel'nikova A.P., Agalakova D.Y. Electrostatic and steric mechanisms of iron oxide nanoparticle sol stabilization by chitosan // Polymer Science Series A. 2014. V. 56. N 4. P. 498–504. https://doi.org/10.1134/S0965545X14040178

References

- Makhadmeh G.N., Abuelsamen A., Al-Akhras M-A.H., Aziz A.A. Silica nanoparticles encapsulated cichorium pumilum as a promising photosensitizer for osteosarcoma photodynamic therapy: In-vitro study. *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy*, 2022, vol. 38, pp. 102801. https://doi.org/10.1016/j.pdpdt.2022.102801
- Chiode M.M.M., Colonello G.P., Kabadayan F., Silva J.D.S., Suffredini I.B., Saraceni C.H.C. Plant extract incorporated into glass ionomer cement as a photosensitizing agent for antimicrobial photodynamic therapy on Streptococcus mutans. *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy*, 2022, vol. 38, pp. 102788. https://doi. org/10.1016/j.pdpdt.2022.102788
- Sarker M.A.R., Ahn Y.-H. Strategic insight into enhanced photocatalytic remediation of pharmaceutical contaminants using spherical CdO nanoparticles in visible light region. *Chemosphere*, 2023, vol. 311, part 1, pp. 137040. https://doi.org/10.1016/j. chemosphere.2022.137040
- Huang W.H., Zhang Q.W., Yuan C.S., Wang C.Z., Li S.P., Zhou H.H. Chemical constituents of the plants from the genus Oplopanax. *Chemistry & Biodiversity*, 2014, vol. 11, no. 2, pp. 181–196. https:// doi.org/10.1002/cbdv.201200306
- Zakłos-Szyda M., Pawlik N. The influence of viburnum opulus polyphenolic compounds on metabolic activity and migration of hela and mcf cells. *Acta Innovations*, 2019, vol. 31, pp. 33–42. https://doi. org/10.32933/ActaInnovations.31.4
- Bina F., Soleymani S., Toliat T., Hajimahmoodi M., Tabarrai M., Abdollahi M., Rahimi R. Plant-derived medicines for treatment of endometriosis: A comprehensive review of molecular mechanisms. *Pharmacological Research*, 2019, vol. 139, pp. 76–90. https://doi. org/10.1016/j.phrs.2018.11.008
- Ozkan G., Kostka T., Dräger G., Capanoglu E., Esatbeyoglu T. Bioaccessibility and transepithelial transportation of cranberrybush (Viburnum Opulus) phenolics: Effects of non-thermal processing and food matrix. *Food Chemistry*, 2022, vol. 380, pp. 132036. https://doi. org/10.1016/j.foodchem.2021.132036
- Kajszczak D., Zakłos-Szyda M., Podsędek A. Viburnum Opulus L.—A review of phytochemistry and biological effects. *Nutrients*, 2020, vol. 12, no. 11, pp. 3398. https://doi.org/10.3390/nu12113398
- Khalaf M.Z., Hassan B.H., Shbar A.K., Naher F.H., Salman A.H., Jabo N.F. Current status of population density of mediterranean fruit fly (Ceratitis Capitata) in fruit orchards in Central Iraq. *Journal of Agricultural Science and Technology*, 2011, pp. 773–777.
- Saltan G., Süntar I., Ozbilgin S., Ilhan M., Demirel M.A., Oz B.E., Keleş H., Akkol E.K. Viburnum opulus L.: A remedy for the treatment of endometriosis demonstrated by rat model of surgically-induced endometriosis. *Journal of Ethnopharmacology*, 2016, vol. 193, pp. 450–455. https://doi.org/10.1016/j.jep.2016.09.029
- Perova I.B., Zhogova A.A., Cherkashin A.V., Éller K.I., Ramenskaya G.V., Samylina I.A. Biologically active substances from european guelder berry fruits. *Pharmaceutical Chemistry Journal*, 2014, vol. 48, no. 5, pp. 332–339. https://doi.org/10.1007/s11094-014-1105-8
- Qiu S., Zhou S., Tan Y., Feng J., Bai Y., He J., Cao H., Che Q., Guo J., Su Z. Biodegradation and prospect of polysaccharide from crustaceans. *Marine Drugs*, 2022, vol. 20, no. 5, pp. 310. https://doi. org/10.3390/md20050310
- Skryabin K.G., Mikhailova S.N. Chitosan: Collection of articles. Nuclear Physics, 2013, vol. 13, pp. 104–116.
- Shi Z., Neoh K.G., Kang E.T., Wang W. Antibacterial and Mechanical properties of bone cement impregnated with chitosan nanoparticles. *Biomaterials*, 2006, vol. 27, no. 11, pp. 2440–2449. https://doi. org/10.1016/j.biomaterials.2005.11.036
- Fernandes J.C., Tavaria F.K., Soares J.C., Ramos Ó.S., João Monteiro M., Pintado M.E., Xavier Malcata F. Antimicrobial effects of chitosans and chitooligosaccharides, upon Staphylococcus aureus and Escherichia coli, in food model systems. *Food Microbiology*, 2008, vol. 25, no. 7, pp. 922–928. https://doi.org/10.1016/j. fm.2008.05.003
- Dydykina V.N., Eremina Yu.D., Koryagin A.S., Smirnov V.P., Smirnova L.A. Influence of nanostructures systems of "chitosan-gold nanoparticles", "chitosan-apitoxin-gold nanoparticles" on the structure and mass of the tumor, peroxidation of lipids and functional state of rats having RS-1 tumor. *Medicinskij al'manah*, 2016, no. 2(42), pp. 133–137. (in Russian)
- 17. Tyukova I.S., Safronov A.P., Kotel'nikova A.P., Agalakova D.Y. Electrostatic and steric mechanisms of iron oxide nanoparticle sol

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

- Абилова Г.К., Махаева Д.Н., Ирмухаметова Г.С., Хуторянский В.В. Гидрогели на основе хитозана и их применение в медицине // Вестник Казахского национального университета. Серия химическая. 2020. Т. 97. № 2. С. 16–28. https://doi. org/10.15328/cb1100
- Iordansky A.L., Rogovina S.Z., Kosenko R.Y., Ivantsova E.L., Prut E.V. Development of a biodegradable polyhydroxybutyratechitosan-rifampicin composition for controlled transport of biologically active compounds // Doklady Physical Chemistry. 2010. V. 431. N 2. P. 60–62. https://doi.org/10.1134/S0012501610040020
- Агабеков В., Куликовская В., Гилевская К., Дубатовка Е. Нано- и микроконтейнеры для доставки биологически активных веществ // Наука и инновации. 2017. № 4. С. 16–19.
- 21. Полюдова Т.В., Шагдарова Б.Ц., Коробов В.П., Варламов В.П. Бактериальная адгезия и образование биопленок в присутствии хитозана и его производных // Микробиология. 2019. Т. 88. № 2. С. 129–136. https://doi.org/10.1134/s0026365619020083
- Ahmad N., Muhammad J., Khan K., Ali W., Fazal H., Ali M., Rahman L., Khan H., Uddin M.N., Abbasi B.H., Hano C. Silver and gold nanoparticles induced differential antimicrobial potential in calli cultures of Prunella vulgaris // BMC Chemistry. 2022. V. 16. P. 20. https://doi.org/10.1186/s13065-022-00816-y
- Dykman L., Khlebtsov N. Gold nanoparticles in biomedical applications: recent advances and perspectives // Chemical Society Reviews. 2012. V. 41. N 6. P. 2256–2282. https://doi.org/10.1039/ clcs15166e
- 24. Гладкова Е.В., Бабушкина И.В., Белова С.В., Мамонова И.А., Карякина Е.В., Конюченко Е.А. Возможности использования хитозана и наночастиц металлов в регенерации экспериментальных ран // Фундаментальные исследования. 2013. № 7-3. С. 530– 533.
- 25. Rakhmetova A.A., Bogoslovskaya O.A., Olkhovskaya I.P., Zhigach A.N., Ilyina A.V., Varlamov V.P., Gluschenko N.N. Concomitant action of organic and inorganic nanoparticles in wound healing and antibacterial resistance: Chitosan and copper nanoparticles in an ointment as an example // Nanotechnologies in Russia. 2015. V. 10. N 1-2. P. 149–157. https://doi.org/10.1134/ s1995078015010164
- Pérez-Díaz M.A., Prado-Prone G., Díaz-Ballesteros A., González-Torres M., Silva-Bermudez P., Sánchez-Sánchez R. Nanoparticle and nanomaterial involvement during the wound healing process: an update in the field // Journal of Nanoparticle Research. 2023. V. 25. P. 27. https://doi.org/10.1007/s11051-023-05675-9
- Rubina M.S., Elmanovich I.V., Shulenina A.V., Peters G.S., Svetogorov R.D., Egorov A.A., Naumkin A.V., Vasil'kov A.Y. Chitosan aerogel containing silver nanoparticles: from metal-chitosan powder to porous material // Polymer Testing. 2020. V. 86. P. 106481. https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2020.106481
- Раик С.В., Гасилова Е.Р., Добродумов А.В., Скорик Ю.А. Изучение структуры и физико-химических свойств продуктов взаимодействия хитозана и N-(2-хлорэтил)-N,N-диэтиламина // Известия Уфимского научного центра РАН. 2018. № 3(2). С. 75– 79. https://doi.org/10.31040/2222-8349-2018-2-3-75-79
- Özdemir S., Karaküçük A., Çakırlı E., Sürücü B., Üner B., Barak T.H., Bardakçı H. Development and characterization of Viburnum opulus I. extract-loaded orodispersible films: potential route of administration for phytochemicals // Journal of Pharmaceutical Innovation. 2023. V. 18. N 1. P. 90–101. https://doi.org/10.1007/s12247-022-09627-z
- Popletaeva S.B., Arslanova L.R. Use of Chitosan nanoparticles loaded with biologically active substances for pre-harvest plant protection from pathogens (a review) // Journal of Physics: Conference Series. 2021. V. 1942. P. 012077. https://doi.org/10.1088/1742-6596/1942/1/012077
- Bratu D.C., Pop S.I., Balan R., Dudescu M., Petrescu H.P., Popa G. Effect of different artificial saliva on the mechanical properties of orthodontic elastomers ligatures // Materiale Plastice. 2013. V. 50. N 1. P. 49–52.
- Mocanu G., Nichifor M., Mihai D., Oproiu L.C. Bioactive cotton fabrics containing chitosan and biologically active substances extracted from plants // Materials Science and Engineering: C. 2013. V. 33. N 1. P. 72–77. https://doi.org/10.1016/j.msec.2012.08.007
- 33. Rahman A., Goswami T., Tyagi N., Ghosh H.N., Neelakandan P.P. Hot electron migration from gold nanoparticle to an organic molecule enhances luminescence and photosensitization properties of a pH activatable plasmon-molecule coupled nanocomposite // Journal of

stabilization by chitosan. *Polymer Science Series A*, 2014, vol. 56, no. 4, pp. 498–504. https://doi.org/10.1134/S0965545X14040178

- Abilova G.K., Makhayeva D.N., Irmukhametova G.S., Khutoryanskiy V.V. Chitosan based hydrogels and their use in medicine *Chemical Bulletin of Kazakh National University*, 2020, vol. 97, no. 2, pp. 16–28. (in Russian). https://doi.org/10.15328/ cb1100
- Iordansky A.L., Rogovina S.Z., Kosenko R.Y., Ivantsova E.L., Prut E.V. Development of a biodegradable polyhydroxybutyratechitosan-rifampicin composition for controlled transport of biologically active compounds. *Doklady Physical Chemistry*, 2010, vol. 431, no 2, pp. 60–62. https://doi.org/10.1134/ S0012501610040020
- Agabekov V., Kulikouskaya V., Hileuskaya K., Dubatouka K. Nanoand microcontainers for the biologically active substances delivery. *Nauka i innovacii*, 2017, no. 4, pp. 16–19. (in Russian)
- Polyudova T.V., Korobov V.P., Shagdarova B.T., Varlamov V.P. Bacterial adhesion and biofilm formation in the presence of chitosan and its derivatives. *Microbiology*, 2019, vol. 88, no. 2, pp. 125–131. https://doi.org/10.1134/S0026261719020085
- 22. Ahmad N., Muhammad J., Khan K., Ali W., Fazal H., Ali M., Rahman L., Khan H., Uddin M.N., Abbasi B.H., Hano C. Silver and gold nanoparticles induced differential antimicrobial potential in calli cultures of Prunella vulgaris. *BMC Chemistry*, 2022, vol. 16, pp. 20. https://doi.org/10.1186/s13065-022-00816-y
- Dykman L., Khlebtsov N. Gold nanoparticles in biomedical applications: recent advances and perspectives. *Chemical Society Reviews*, 2012, vol. 41, no. 6, pp. 2256–2282. https://doi.org/10.1039/ c1cs15166e
- Gladkova E.V., Babushkina I.V., Belova S.V., Mamonova I.A., Karyakina E.V., Konjuchenko E.A. Capabilities of use of chitosan and metal nanoparticles in regeneration of experimental wounds. *Fundamental Research*, 2013, no. 7-3, pp. 530–533. (in Russian)
- 25. Rakhmetova A.A., Bogoslovskaya O.A., Olkhovskaya I.P., Zhigach A.N., Ilyina A.V., Varlamov V.P., Gluschenko N.N. Concomitant action of organic and inorganic nanoparticles in wound healing and antibacterial resistance: Chitosan and copper nanoparticles in an ointment as an example. *Nanotechnologies in Russia*, 2015, vol. 10, no. 1-2, pp. 149–157. https://doi.org/10.1134/ s1995078015010164
- Pérez-Díaz M.A., Prado-Prone G., Díaz-Ballesteros A., González-Torres M., Silva-Bermudez P., Sánchez-Sánchez R. Nanoparticle and nanomaterial involvement during the wound healing process: an update in the field. *Journal of Nanoparticle Research*, 2023, vol. 25, pp. 27. https://doi.org/10.1007/s11051-023-05675-9
- Rubina M.S., Elmanovich I.V., Shulenina A.V., Peters G.S., Svetogorov R.D., Egorov A.A., Naumkin A.V., Vasil'kov A.Y. Chitosan aerogel containing silver nanoparticles: from metal-chitosan powder to porous material. *Polymer Testing*, 2020, vol. 86, pp. 106481. https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2020.106481
- Raik S.V., Gasilova E.R., Dobrodumov A.V., Skorik Y.A. Study of structure and physico-chemical properties of reaction products of chitosan and N-(2-chloroethyl)-N,N-diethylamine. *Proceedings of the RAS Ufa Scientific Centre*, 2018, no. 3(2), pp. 75–79. (in Russian). https://doi.org/10.31040/2222-8349-2018-2-3-75-79
- Özdemir S., Karaküçük A., Çakırlı E., Sürücü B., Üner B., Barak T.H., Bardakçı H. Development and characterization of Viburnum opulus I. extract-loaded orodispersible films: potential route of administration for phytochemicals. *Journal of Pharmaceutical Innovation*, 2023, vol. 18, no. 1, pp. 90–101. https://doi.org/10.1007/s12247-022-09627-z
- Popletaeva S.B., Arslanova L.R. Use of Chitosan nanoparticles loaded with biologically active substances for pre-harvest plant protection from pathogens (a review). *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, vol. 1942, pp. 012077. https://doi.org/10.1088/1742-6596/1942/1/012077
- Bratu D.C., Pop S.I., Balan R., Dudescu M., Petrescu H.P., Popa G. Effect of different artificial saliva on the mechanical properties of orthodontic elastomers ligatures. *Materiale Plastice*, 2013, vol. 50, no. 1, pp. 49–52.
- Mocanu G., Nichifor M., Mihai D., Oproiu L.C. Bioactive cotton fabrics containing chitosan and biologically active substances extracted from plants. *Materials Science and Engineering: C*, 2013, vol. 33, mo. 1, pp. 72–77. https://doi.org/10.1016/j.msec.2012.08.007
- Rahman A., Goswami T., Tyagi N., Ghosh H.N., Neelakandan P.P. Hot electron migration from gold nanoparticle to an organic molecule

Photochemistry & Photobiology A: Chemistry. 2022. V. 432. P. 114067. https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2022.114067

- 34. Ge M., Liu S., Li J., Li M., Li S., James T.D., Chen Z. Luminescent materials derived from biomass resources // Coordination Chemistry Reviews. 2023. V. 477. P. 214951. https://doi.org/10.1016/j. ccr.2022.214951
- 35. Бельтюкова С.В., Степанова А.А., Ливенцова Е.О. Антиоксиданты в пищевых продуктах и методы их определения // Вісник ОНУ. Хімія. 2014. Т. 19. N 4. С. 16–30.
- Bondarev S.L., Knyukshto V.N., Tikhomirov S.A., Buganov O.V., Pyrko A.N. Photodynamics of intramolecular proton transfer in polar and nonpolar biflavonoid solutions // Optics and Spectroscopy. 2012. V. 113. N 4. P. 401–410. https://doi.org/10.1134/s0030400x12070065
- Зенкевич И.Г., Пушкарева Т.И. О моделировании механизма образования димерных продуктов окисления флавоноидов // Химия растительного сырья. 2018. № 3. С. 185–197. https://doi. org/10.14258/jcprm.2018033589
- Tcibulnikova A., Zemliakova E., Artamonov D., Slezhkin V., Skrypnik L., Samusev I., Zyubin A., Khankaev A., Bryukhanov V., Lyatun I. Photonics of Viburnum opulus L. extracts in microemulsions with oxygen and gold nanoparticles // Chemosensors. 2022. V. 10. N 4. P. 130. https://doi.org/10.3390/chemosensors10040130
- Tcibulnikova A., Zemlyakova E., Slezhkin V., Samusev I.G., Bryukhanov V.V., Khankaev A., Artamonov D. Spectroscopy of triplet-excited complexes of oxygen with spruce cone molecules extract from picea abies in AOT micelles under combined photoexcitation // Journal of Molecular Structure. 2022. V. 1259. P. 132661. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.132661
- Zemlyakova E.S., Tcibulnikova A.V., Slezhkin V.A., Zyubin A.Yu., Samusev I.G., Bryukhanov V.V. The infrared spectroscopy of chitosan films doped with silver and gold nanoparticles // Journal of Polymer Engineering. 2019. V. 39. N 5. P. 415–421. https://doi.org/10.1515/ polyeng-2018-0356
- Tcibulnikova A.V., Degterev I.A., Bryukhanov V.V., Roberto M.M., Campos Pereira F.D., Marin-Morales M.A., Slezhkin V.A., Samusev I.G. The participation of singlet oxygen in a photocitotoxicity of extract from amazon plant to cancer cells // Proceedings of SPIE. 2018. V. 10456. P. 104563E. https://doi. org/10.1117/12.2283317
- Deineka V.I., Kul'chenko Y.Y., Blinova I.P., Chulkov A.N., Deineka L.A. Anthocyanins of basil leaves: Determination and preparation of dried encapsulated forms // Russian Journal of Bioorganic Chemistry. 2019. V. 45. P. 895–899. https://doi. org/10.1134/S1068162019070021
- Nagai S., Ohara K., Mukai K. Kinetic study of the quenching reaction of singlet oxygen by flavonoids in ethanol solution // Journal of Physical Chemistry B. 2005. V. 109. N 9. P. 4234–4240. https://doi. org/10.1021/jp0451389
- Shraim A.M., Ahmed T.A., Rahman M.M., Hijji Y.M. Determination of Total flavonoid content by aluminum chloride assay: A critical evaluation // LWT. 2021. V. 150. P. 111932. https://doi.org/10.1016/j. lwt.2021.111932
- 45. Guo Y., Qu Y., Yu J., Song L., Chen S., Qin Z., Gong J., Zhan H., Gao Y., Zhang J. A chitosan-vitamin c based injectable hydrogel improves cell survival under oxidative stress // International Journal of Biological Macromolecules. 2022. V. 202. P. 102–111. https://doi. org/10.1016/j.ijbiomac.2022.01.030
- 46. Пушкарёва Т.Й., Зенкевич И.Г. Хромато-масс-спектрометрическая идентификация продуктов окисления кверцетина кислородом воздуха в водных растворах // Вестник Санкт-Петербургского университета. Физика и химия. 2017. Т. 4. № 1. С. 59–79. https:// doi.org/10.21638/11701/spbu04.2017.107
- 47. Fuentes J., Atala E., Pastene E., Carrasco-Pozo C., Speisky H. Quercetin oxidation paradoxically enhances its antioxidant and cytoprotective properties // Journal of Agricultural and Food Chemistry. 2017. V. 65. N 50. P. 11002–11010. https://doi. org/10.1021/acs.jafc.7b05214

enhances luminescence and photosensitization properties of a pH activatable plasmon-molecule coupled nanocomposite. *Journal of Photochemistry & Photobiology A: Chemistry*, 2022, vol. 432, pp. 114067. https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2022.114067

- 34. Ge M., Liu S., Li J., Li M., Li S., James T.D., Chen Z. Luminescent materials derived from biomass resources. *Coordination Chemistry Reviews*, 2023, vol. 477, pp. 214951. https://doi.org/10.1016/j. ccr.2022.214951
- Beltyukova S.V., Stepanova A.A., Liventsova E.O. Antioxidants in food products and methods of their determination. *Visnik ONU*. *Himija*, 2014, vol. 19, no. 4, pp. 16–30. (in Russian)
- Bondarev S.L., Knyukshto V.N., Tikhomirov S.A., Buganov O.V., Pyrko A.N. Photodynamics of intramolecular proton transfer in polar and nonpolar biflavonoid solutions. *Optics and Spectroscopy*. 2012, vol. 113, no. 4, pp. 401–410. https://doi.org/10.1134/ s0030400x12070065
- Zenkevich I.G., Pushkareva T.I. On the modeling the formation of flavonoid oxidation dimeric products. *Chemistry of Plant Raw Material*, 2018, no. 3, pp. 185–197. (in Russian). https://doi. org/10.14258/jcprm.2018033589
- Tcibulnikova A., Zemliakova E., Artamonov D., Slezhkin V., Skrypnik L., Samusev I., Zyubin A., Khankaev A., Bryukhanov V., Lyatun I. Photonics of Viburnum opulus L. extracts in microemulsions with oxygen and gold nanoparticles. *Chemosensors*, 2022, vol. 10, no. 4, pp. 130. https://doi.org/10.3390/chemosensors10040130
- Tcibulnikova A., Zemlyakova E., Slezhkin V., Samusev I.G., Bryukhanov V.V., Khankaev A., Artamonov D. Spectroscopy of triplet-excited complexes of oxygen with spruce cone molecules extract from picea abies in AOT micelles under combined photoexcitation. *Journal of Molecular Structure*, 2022, vol. 1259, pp. 132661. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.132661
- Zemlyakova E.S., Tcibulnikova A.V., Slezhkin V.A., Zyubin A.Yu., Samusev I.G., Bryukhanov V.V. The infrared spectroscopy of chitosan films doped with silver and gold nanoparticles. *Journal of Polymer Engineering*, 2019, vol. 39, no. 5, pp. 415–421. https://doi. org/10.1515/polyeng-2018-0356
- Tcibulnikova A.V., Degterev I.A., Bryukhanov V.V., Roberto M.M., Campos Pereira F.D., Marin-Morales M.A., Slezhkin V.A., Samusev I.G. The participation of singlet oxygen in a photocitotoxicity of extract from amazon plant to cancer cells. *Proceedings of SPIE*, 2018, vol. 10456, pp. 104563E. https://doi. org/10.1117/12.2283317
- Deineka V.I., Kul'chenko Y.Y., Blinova I.P., Chulkov A.N., Deineka L.A. Anthocyanins of basil leaves: Determination and preparation of dried encapsulated forms. *Russian Journal of Bioorganic Chemistry*, 2019, vol. 45, pp. 895–899. https://doi. org/10.1134/S1068162019070021
- Nagai S., Ohara K., Mukai K. Kinetic study of the quenching reaction of singlet oxygen by flavonoids in ethanol solution. *Journal of Physical Chemistry B*, 2005, vol. 109, no. 9, pp. 4234–4240. https:// doi.org/10.1021/jp0451389
- Shraim A.M., Ahmed T.A., Rahman M.M., Hijji Y.M. Determination of Total flavonoid content by aluminum chloride assay: A critical evaluation. *LWT*, 2021, vol. 150, pp. 111932. https://doi.org/10.1016/j. lwt.2021.111932
- 45. Guo Y., Qu Y., Yu J., Song L., Chen S., Qin Z., Gong J., Zhan H., Gao Y., Zhang J. A chitosan-vitamin c based injectable hydrogel improves cell survival under oxidative stress. *International Journal* of Biological Macromolecules, 2022, vol. 202, pp. 102–111. https:// doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2022.01.030
- Pushkareva T.I., Zenkevich I.G. Chromato-mass spectrometric identification of products of quercetin oxidation by atmospheric oxygen in aqueous solutions. *Vestnik SPbSU. Physics and Chemistry*, 2017, vol. 4, no. 1, pp. 59–79. (in Rusian). https://doi. org/10.21638/11701/spbu04.2017.107
- 47. Fuentes J., Atala E., Pastene E., Carrasco-Pozo C., Speisky H. Quercetin oxidation paradoxically enhances its antioxidant and cytoprotective properties. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2017, vol. 65, no. 50, pp. 11002–11010. https://doi. org/10.1021/acs.jafc.7b05214

Авторы

Цибульникова Анна Владимировна — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, sc 57193169565, https://orcid.org/0000-0001-8578-0701, memorgold@mail.ru

Землякова Евгения Сергеевна — кандидат технических наук, доцент, инженер, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация; доцент, Калининградский государственный технический университет, Калининград, 236022, Российская Федерация, вс 57207346578, https:// orcid.org/0000-0002-0974-3914, evgeniya.zemljakova@klgtu.ru

Артамонов Дмитрий Александрович — аспирант, техник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0003-2141-8900, euroset2016ig98@icloud.com

Слежкин Василий Анатольевич — кандидат химических наук, доцент, старший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация; доцент, Калининградский государственный технический университет, Калининград, 236022, Российская Федерация, sc 6506061436, https://orcid.org/0000-0002-2801-7029, vasiliy.slezhkin@klgtu.ru

Самусев Илья Геннадьевич — кандидат физико-математических наук, директор департамента, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, sc 12779220200, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510, is.cranz@gmail.com

Зюбин Андрей Юрьевич — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, sc 57193159520, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408, azubin@mail.ru

Брюханов Валерий Веннаминович — доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, sc 7003848491, https://orcid.org/0000-0003-4689-7207, Bryukhanov_v.v@mail.ru

Статья поступила в редакцию 06.09.2023 Одобрена после рецензирования 19.10.2023 Принята к печати 28.11.2023

BY NC

azubin@mail.ru

is.cranz@gmail.com

Valery V. Bryukhanov — D.Sc. (Physics & Mathematics), Leading Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, se 7003848491, https://orcid.org/0000-0003-4689-7207, Bryukhanov_v.v@mail.ru

Received 06.09.2023 Approved after reviewing 19.10.2023 Accepted 28.11.2023

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

Authors

Anna V. Tsibulnikova — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, sc 57193169565, https://orcid.org/0000-0001-8578-0701, memorgold@mail.ru

Evgeniya S. Zemlyakova — PhD, Associate Professor, Engineer, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation; Associate Professor, Kaliningrad State Technical University, Kaliningrad, 236022, Russian Federation, SC 57207346578, https://orcid. org/0000-0002-0974-3914, evgeniya.zemljakova@klgtu.ru

Dmitry A. Artamonov — PhD Student, Technician, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0003-2141-8900, euroset2016ig98@icloud.com

Vasily A. Slezhkin — PhD (Chemistry), Associate Professor, Senior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation; Kaliningrad State Technical University, Kaliningrad, 236022, Russian Federation, sc 6506061436, https://orcid. org/0000-0002-2801-7029, vasiliy.slezhkin@klgtu.ru

Ilia G. Samusev — PhD (Physics & Mathematics), Head of Department,

Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian

Federation, sc 12779220200, https://orcid.org/0000-0001-5026-7510,

Andrev Yu. Zubin — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher,

Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian

Federation, sc 57193159520, https://orcid.org/0000-0002-9766-1408,

I/İTMO

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

научно-технический вестник ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

АВТОМАТИЧЕСКОЕ УПРАВЛЕНИЕ И РОБОТОТЕХНИКА AUTOMATIC CONTROL AND ROBOTICS

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1096-1105

Dynamic surface control for omnidirectional mobile robot with full state constrains and input saturation

Chen Zhiqiang¹, Aleksandr Yu. Krasnov², Liao Duzhesheng³, Yang Qiusheng⁴

1,2,3,4 ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ Snowchen612@outlook.com^{\Box}, https://orcid.org/0009-0007-6813-2287

² aykrasnov@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0001-6026-6706

³ ldzs2015@gmail.com, https://orcid.org/0009-0000-6389-1355

⁴ 1799797481@qq.com, https://orcid.org/0009-0007-5839-0258

Abstract

In this paper, we study the trajectory tracking problem of a three-wheeled omnidirectional mobile robot with full state constraints and actuator saturation. Firstly, we analyze a three-wheeled omnidirectional mobile robot and give control model with actuator saturation. By using tan-type Barrier Lyapunov Function and backstepping method, kinematic and dynamic controllers are built, which can ensure that the system full states will not violate the given constraints when the robot is performing trajectory tracking. Then, considering the differential explosion problem which occurs when solving the derivatives of the virtual control law, we use a second-order differential sliding mode surface to calculate it, so as to reduce the complexity of the operation. In addition, due to the output saturation problem of the robot drive motor, an auxiliary compensation system is adopted to compensate for the error generated by the saturation function. Finally, an experimental simulation is performed in MATLAB and the simulation results illustrate the effectiveness of the control algorithm proposed in this paper.

Keywords

full state constrains, barrier Lyapunov function, input saturation, omnidirectional mobile robot, dynamic surface control, backstepping method

For citation: Zhiqiang C., Krasnov A.Yu., Duzhesheng L., Qiusheng Y. Dynamic surface control for omnidirectional mobile robot with full state constrains and input saturation. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1096–1105. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1096-1105

УДК 62-50

Динамическое поверхностное управление всенаправленным мобильным роботом с полными ограничениями состояния и насыщением входа

Чэнь Чжицян¹⊠, Александр Юрьевич Краснов², Ляо Дучжэшэн³, Ян Цюшэн⁴

1,2,3,4 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ Snowchen612@outlook.com^{\Box}, https://orcid.org/0009-0007-6813-2287

² aykrasnov@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0001-6026-6706

³ ldzs2015@gmail.com, https://orcid.org/0009-0000-6389-1355

⁴ 1799797481@qq.com, https://orcid.org/0009-0007-5839-0258

Аннотация

Введение. Исследована задача управления траекторией движения всенаправленного мобильного робота с полными ограничениями на состояние и насыщением входного сигнала. При движении робота в узком пространстве чрезмерные ошибки отслеживания траектории и скорости могут привести к столкновению. На практике явление насыщения входного сигнала двигателя может привести к тому, что контроллер не сможет достичь требуемых характеристик слежения. По этой причине при проектировании контроллера важно ограничить вектор состояния робота и компенсировать ошибку момента, которая возникает из-за насыщения привода. Метод. С помощью барьерной функции Ляпунова и метода backstepping проектируется виртуальный

[©] Zhiqiang C., Krasnov A.Yu., Duzhesheng L., Qiusheng Y., 2023

регулятор и регулятор динамики, которые обеспечивают стабилизацию состояния системы в заданной области ограничений при движении робота по траектории. Производная виртуального закона управления рассчитывается методом динамических поверхностей, что снижает вычислительную сложность. Для устранения влияния неопределенности параметров на движение робота и оценки неизвестных частей его модели применены нейронные сети. Для компенсации ошибок, возникающих при насыщении исполнительных механизмов, создана вспомогательная система. **Основные результаты.** Имитационный эксперимент выполнен в пакете прикладных программ MATLAB. Экспериментальные исследования показали, что разработанный алгоритм управления может реализовать точное траекторное движение робота в условиях ограничения состояний системы и насыщения входного сигнала в исполнительных механизмах. **Обсуждение.** Метод может быть применен для решения задачи управления мобильным роботом в ограниченном пространстве. Аналогичным образом он может быть применен ко всем роботам с аналогичной математической моделью.

Ключевые слова

ограничения полного состояния, барьерная функция Ляпунова, насыщение входа, всенаправленный мобильный робот, динамическое управление поверхностью, метод backstepping

Ссылка для цитирования: Чжицян Ч., Краснов А.Ю., Дучжэшэн Л., Цюшэн Я. Динамическое поверхностное управление всенаправленным мобильным роботом с полными ограничениями состояния и насыщением входа // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1096–1105 (на англ. яз.). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1096-1105

Introduction

In recent years, with the rapid development of robotics technology, mobile robots have been widely used in various fields, such as logistics and warehousing, factory manufacturing, military field, and space exploration. In comparison with differential drive robots, omnidirectional mobile robots do not have the problem of incomplete constraints and are able to realize unconstrained plane motion [1]. At present, many scholars have studied omnidirectional mobile robots [2-4]. Watanabe [2] studied the omnidirectional mobile robotic robot and designed the controller using the feedback control method. Tamás [3] studied the four-wheeled omnidirectional mobile robot, established the kinematic and dynamic models, and proposed the trajectory planning method and trajectory tracking control algorithm; Liu [4] investigated the threewheeled omni-directional mobile robot and designed the controller based on the dynamics model by using the trajectory linearization method. In actuality, however, there is uncertainty in the robot model due to manufacturing errors and disturbances in external environmental factors. The control methods proposed by the above scholars do not take into account the effects of parameter uncertainty and external disturbances, making it difficult to realize the desired control performance in practical experiments.

On the trajectory tracking problem, many scholars have proposed mature control plans (e.g., adaptive control, sliding mode control, neural network control, model predictive control, and fuzzy control). Considering the problems of wheel slippage and model parameter uncertainty, Huang [5] proposed an adaptive backstepping control method. Alakshendra [6] considered the effects of parameter uncertainty and external perturbation, proposed an adaptive sliding mode control method by combining sliding mode control with adaptive control which achieved good performance. Lu [7] designed an adaptive neural network sliding mode control scheme by using neural networks to approximate the uncertain part of the model. Zijie [8] used a fuzzy neural network to adjust parameters of the control gain for reducing the chattering phenomenon in the sliding mode control. In practice, however, it is often necessary to consider

the safety of robot usage. According to the environment and the size of the space in which the robot operates, limits are set on the tracking error and the velocity of the motion. In addition, due to the limitation of hardware performance, the output torque of the controller may exceed the maximum output of the motor resulting the input saturation problem and affecting the trajectory tracking accuracy. Therefore, the input saturation problem also must be considered.

The Barrier Lyapunov Function (BLF) is a frequently used method for the tracking control problem with state constraints. Tee [9] proposed an adaptive control method by combining the backstepping method with the Barrier Lyapunov Function. Xi [10] improved the Lyapunov barrier function and used a radial basis neural network to approximate the unknown part of the robot model, ensuring changing in state time-varying constraints. Ding [11] used neural networks and Lyapunov barrier functions in the trajectory tracking problem of a two-wheeled differential mobile robot and achieved good tracking performance. Dong [12] created a finite time tracking controller to ensure that the state of the system is stabilized in a certain range for a finite period of time.

Saturation compensation is a common approach for actuator input saturation problem. Doyle [13] proposed a control scheme for input saturation by replacing the saturation function with an inverse tangent function, and proved the stability of the controller by using the backstepping method. Mofid [14] created an adaptive robust controller by considering the effects of input saturation and external perturbations on the system. Chen [15] limited the speed to a diamond-shaped range, achieving tracking control in the case of input saturation. By designing an auxiliary system to compensate for the nonlinear term generated by input saturation, Yang [16] had achieved state constrains and input saturation control of a nonlinear system.

Inspired by the above literature, this paper investigates the trajectory tracking problem of a three wheeled omnidirectional mobile robot with full state constraints and actuator saturation. The details of the study are as follows: — For the problem of full-state constraints. By combining

the tan-type Lyapunov barrier function and the

backstepping method, kinematics and dynamics controllers were designed. They ensure that all the states of a three-wheeled omnidirectional mobile robot in trajectory tracking motion are within the constraints.

- In order to avoid the differential explosion problem, the derivative of the virtual control law is calculated using the Dynamic Surface Control technique.
- According to reference [17], an auxiliary system is used to compensate for the nonlinear disturbance generated by input saturation.
- Simulation experiments were carried out using MATLAB. The experimental results show the effectiveness of the proposed algorithm in this paper.

Model of Robot

The three-wheeled omnidirectional mobile robot is shown in Fig 1. {x, o, y} is the world coordinate system and { x_r , y_r , θ_r } is the robot coordinate system; o_r is the mass center of the robot; L is the distance from the robot's mass center to the driving wheel; I_V is the robot's moment of inertia; $\mathbf{q} = (x, y, \theta)^T$ is the robot's posture; (x, y) is the coordinate of the robot's mass center in the world coordinate system; and θ is the angle between the robot's coordinate system and the world coordinate system. The robot is supported by three omnidirectional wheels which allow longitudinal and lateral movements as well as rotational movements on a plane surface. (f_1, f_2, f_3) is the driving force output from the drive wheels.

The kinematic model of the robot is shown in equation

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{S}(\mathbf{q})\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0\\ \sin\theta & \cos\theta & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x\\ v_y\\ \omega \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

where $\dot{\mathbf{q}} = (\dot{x}, \dot{y}, \dot{\theta})^T$ is the velocity and angular velocity of the robot's mass center in the world coordinate system; $(\cos\theta - \sin\theta \ 0)$

$$\mathbf{S}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \sin\theta & \cos\theta & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \mathbf{V} = (v_x, v_y, \omega)^T \text{ is the speed and}$$

angular velocity of the robot's mass center in the robot's coordinate system.



Fig. 1. Three-wheeled omnidirectional mobile robot

The relationship between the velocity of the robot's mass center and the angular velocities of the three driving wheels is shown in the equation

$$\mathbf{V} = \mathbf{A}\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \frac{-r}{2} & \frac{-r}{2} & r\\ \frac{\sqrt{3}r}{2} & \frac{-\sqrt{3}r}{2} & 0\\ \frac{r}{L} & \frac{r}{L} & \frac{r}{L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1\\ \omega_2\\ \omega_3 \end{pmatrix}, \qquad (2)$$

where
$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{-2}{2} & \frac{-2}{2} & r\\ \frac{\sqrt{3}r}{2} & \frac{\sqrt{3}r}{2} & 0\\ \frac{r}{L} & \frac{r}{L} & \frac{r}{L} \end{pmatrix}$$
; $\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \omega_1\\ \omega_2\\ \omega_3 \end{pmatrix}$ is the angular

velocities of the three driving wheels; r is the radius of driving wheels.

According to reference [4], the force on a three-wheeled omnidirectional mobile robot can be expressed as follows

$$\begin{cases} m(\dot{v}_{x} - v_{y}\dot{\theta}) = -\frac{f_{1}}{2} - \frac{f_{2}}{2} + f_{3} \\ m(\dot{v}_{y} - v_{x}\dot{\theta}) = \frac{\sqrt{3}}{2}(f_{1} - f_{2}) \\ I_{V}\ddot{\theta} = L(f_{1} + f_{2} + f_{3}) \end{cases}$$
(3)

where *m* is the mass of the robot.

By using the direct current motor equation, the relationship between the output torque of the driving wheel motor and the driving force can be derived as

$$I_w \dot{\omega}_i + c \omega_i = n \tau_i - r f_i, \tag{4}$$

where I_w is the moment of inertia of the driving wheel; *c* is the coefficient of viscous friction; *n* is the speed reduction ratio of the speed reducer; *r* is the radius of the driving wheel; τ_i (*i* = 1, 2, 3) is output torque of the driving wheel motors.

Combining (1)–(4) yields a dynamic model of the robot as:

$$\mathbf{\dot{V}} = \mathbf{A}_{1}\mathbf{V} + F(\mathbf{V}) + \mathbf{B\tau} + \mathbf{d} =$$

$$= \begin{pmatrix} a_{1}v_{x} \\ a_{1}v_{y} \\ a_{3}\omega \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a_{2}\omega v_{y} \\ -a_{2}\omega v_{x} \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -b_{1} & -b_{1} & 2b_{1} \\ \sqrt{3}b_{1} & \sqrt{3}b_{1} & 0 \\ b_{2} & b_{2} & b_{2} \end{pmatrix} \mathbf{\tau} + \mathbf{d}, \quad (5)$$

where $\mathbf{A}_1 = diag(a_1, a_1, a_3), F(\mathbf{V}) = (a_2 \omega v_y, -a_2 \omega v_x, 0)^T$,

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} -b_1 & -b_1 & 2b_1 \\ \sqrt{3}b_1 & \sqrt{3}b_1 & 0 \\ b_2 & b_2 & b_2 \end{pmatrix}, \ \boldsymbol{\tau} \text{ is output torque; } \mathbf{d} \text{ is}$$

disturbance of the system; system parameters are $a_1 = 3c/(3I_w + 2mr^2)$, $a_2 = 2mr^2/(3I_w + 2mr^2)$, $a_3 = 3cL^2/(3I_wL^2 + I_Vr^2)$, $b_1 = nr/(3I_w + 2mr^2)$, $b_2 = krL/(3I_wL^2 + I_Vr^2)$; k is the gain factor of driven torque.

Description of problem

In engineering practice, the drive motor of the mobile robot can only provide limited torque output, so the input saturation problem must be considered when designing the controller. The saturation function of the output torque can be given by the following equation

$$sat(\tau_i) = \begin{cases} \tau_{imax} & \tau_i > \tau_{imax} \\ \tau_i & \tau_{imin} \le \tau_i \le \tau_{imax} \\ -\tau_{imin} & \tau_i < \tau_{imin} \end{cases}$$
(6)

$$sat(\tau_i) = \tau_i - \Delta \tau_i, \tag{7}$$

where τ_{imax} and τ_{imin} are the upper and lower bounds of the motor output; *sat*(τ_i) is the input saturation torque; $\Delta \tau_i$ is input saturation error; τ_i is control torque needs to be designed latter.

Assumption 1. Input saturation error $\Delta \tau$ is bounded, and there exists a positive constant $\theta_{\Delta \tau}$ such that $||\Delta \tau||^2 \le \theta_{\Delta \tau}$.

Combining (1), (5), and (6), one can obtain the model of the three wheeled omnidirectional mobile robot as:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{S}(\mathbf{q})\mathbf{V} \\ \dot{\mathbf{V}} = \mathbf{A}_1\mathbf{V} + F(\mathbf{V}) + \mathbf{B}sat(\mathbf{\tau}) + \mathbf{d} \end{cases}$$
(8)

Assumption 2. External disturbances **d** is a bounded vector, and there exists a positive constant θ_d such that $\|\mathbf{d}\|^2 \leq \theta_d$.

Assumption 3. The model parameters of the three wheeled omnidirectional mobile robot are unknown. $G_i = [\mathbf{A}_1 \mathbf{V} + F(\mathbf{V})]_i \ (i = 1, 2, 3)$ is the unknown continuous function.

Since RBF Neural Network (RBFNN) can approximate any continuous function, this paper uses it to estimate the model unknown term *G*. RBFNN can be represented as

$$G_i = (\hat{\mathbf{W}}^T \boldsymbol{\varphi})_i + \boldsymbol{\delta}_i, \tag{9}$$

where \mathbf{W}^T is the unknown weight vector for the neural network; $\boldsymbol{\varphi}_i$ is activation function vector; $\boldsymbol{\delta}_i$ is the approximation error. The value of the approximation function for the unknown term *G* can be expressed as $\hat{G}_i = (\hat{\mathbf{W}}^T \boldsymbol{\varphi})_i$.

In this paper, the Gaussian basis function [11] is used as the activation function of the neural network

$$\varphi = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{c}_i\|^2}{\sigma_i^2}\right), i = 1, ..., n,$$

where **x** is the input vector; \mathbf{c}_i and σ_i are the center and width of the Gaussian function, respectively; *n* is the number of neural nodes.

Assumption 4. The neural network approximation error $\boldsymbol{\delta}$ is a bounded vector, and there exists a positive constant θ_{δ} such that $||\boldsymbol{\delta}||^2 \leq \theta_{\delta}$.

The input saturation phenomenon presented in the drive motors generates nonlinear perturbations and reduces the trajectory tracking accuracy of the robot, thus it needs to be compensated. Inspired by [17], the compensation system can be designed as

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\beta}}_1 = -\mathbf{L}_1 \boldsymbol{\beta}_1 + \mathbf{S} \boldsymbol{\beta}_2\\ \dot{\boldsymbol{\beta}}_2 = -\mathbf{L}_2 \boldsymbol{\beta}_2 + \mathbf{B} \Delta \boldsymbol{\tau} \end{cases},$$
(10)

where β_1 and β_2 are the state variables of the compensation system; $\mathbf{L}_1 = diag(l_{11}, l_{12}, l_{13}) > 0$, $\mathbf{L}_2 = diag(l_{21}, l_{22}, l_{23}) > 0$ are system parameters.

Assumption 5. The state variables of the compensation system are bounded and satisfy $|\beta_{1i}| < \eta_{1i}$, $|\beta_{2i}| < \eta_{2i}$, η_{1i} , η_{2i} are constants.

Assumption 6. Reference trajectory \mathbf{q}_r , $\mathbf{V}_r = \mathbf{S}^{-1}(\mathbf{q})\dot{\mathbf{q}}_r$ is bounded and satisfies $|q_{ri}| < p_{1i}$, $|V_{ri}| < p_{2i}$. Moreover, the states of robot system are also bounded and satisfy $|q_i| < y_{1i}$, $|V_i| < y_{2i}$.

The purpose of this paper is to design a controller to ensure that the robot accurately tracks a given trajectory, in the presence of unknown model parameters, restricted system states, and input saturation in the actuators.

Controller Design

First of all, the robot trajectory tracking errors are defined as

$$\mathbf{e}_1 = \mathbf{q} - \mathbf{q}_r - \mathbf{\beta}_1,\tag{11}$$

$$\mathbf{e}_2 = \mathbf{V} - \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\beta}_2,\tag{12}$$

where $\mathbf{q}_r = (x_r, y_r, \theta_r)^T$ is the reference trajectory of the robot; $\mathbf{a} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)^T$ is the virtual control law which will be designed later.

Step 1. Taking the derivative of (11), we have

$$\dot{\mathbf{e}}_1 = \dot{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{q}}_r - \dot{\mathbf{\beta}}_1, \tag{13}$$

bringing (1), (10) and (12) into (13) one has

$$\dot{\mathbf{e}}_1 = \mathbf{S}\mathbf{V} - \dot{\mathbf{q}}_r - \dot{\mathbf{\beta}}_1 = \mathbf{S}(\mathbf{e}_2 + \boldsymbol{\alpha}) - \dot{\mathbf{q}}_r + \mathbf{L}_1 \boldsymbol{\beta}_1.$$
(14)

Then we select the barrier Lyapunov function as

$$V_1 = \sum_{i=1}^{3} \frac{b_{1i}^2}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{1i}^2}{2b_{1i}^2}\right) + \frac{1}{2} \beta_1^T \beta_1, \qquad (15)$$

where $\mathbf{b}_1 = (b_{11}, b_{12}, b_{13})^T$ is boundary on the tracking error of the system, to be discussed later; V_1 is a continuous function and greater than zero.

Define

=

$$\lambda_{ji} = \frac{e_{ji}}{\cos^2\left(\frac{\pi e_{ji}^2}{2b_{ji}^2}\right)} \tag{16}$$

taking the derivative of (15) and bringing (16), (14) into the equation gets

$$\dot{V}_{1} = \sum_{i=1}^{3} \frac{e_{1i}\dot{e}_{1i}}{\cos^{2}\left(\frac{\pi e_{1i}^{2}}{2b_{1i}^{2}}\right)} + \boldsymbol{\beta}_{1}^{T}\dot{\boldsymbol{\beta}}_{1} =$$

$$\sum_{i=1}^{3} \lambda_{1i} \left[\mathbf{S}(\mathbf{e}_{2} + \boldsymbol{\alpha}) - \dot{\mathbf{q}}_{r} + \mathbf{L}_{1}\boldsymbol{\beta}_{1} \right]_{i} + \boldsymbol{\beta}_{1}^{T}(-\mathbf{L}_{1}\boldsymbol{\beta}_{1} + \mathbf{S}\boldsymbol{\beta}_{2}) =$$

$$= \sum_{i=1}^{3} \lambda_{1i} \left[\mathbf{S}(\mathbf{e}_{2} + \boldsymbol{\alpha}) - \dot{\mathbf{q}}_{r} + \mathbf{L}_{1}\boldsymbol{\beta}_{1} \right]_{i} - \boldsymbol{\beta}_{1}^{T}\mathbf{L}_{1}\boldsymbol{\beta}_{1} + \boldsymbol{\beta}_{1}^{T}\mathbf{S}\boldsymbol{\beta}_{2}.$$
(17)

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

The we choose of virtual control law as

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{S}^{-1} \left[\frac{-\mathbf{k}_1 \mathbf{b}_1^2 \sin\left(\frac{\pi \mathbf{e}_1^2}{\mathbf{b}_1^2}\right)}{2\pi \mathbf{e}_1} + \dot{\mathbf{q}}_r - \mathbf{L}_1 \boldsymbol{\beta}_1 \right], \qquad (18)$$

where $\mathbf{k}_1 = (k_{11}, k_{12}, k_{13})^T > 0$ is the control gain. From Young's inequality one gets

$$\boldsymbol{\beta}_1^T \mathbf{S} \boldsymbol{\beta}_2 \leq \frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}_1^T \mathbf{S} \boldsymbol{\beta}_1 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}_2^T \mathbf{S} \boldsymbol{\beta}_2.$$
(19)

Carrying equations (18) and (19) into (17) we obtain

$$\dot{V}_{1} \leq \sum_{i=1}^{3} -k_{1i} \frac{b_{1i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{1i}^{2}}{2b_{1i}^{2}}\right) + \sum_{i=1}^{3} \lambda_{1i} (\mathbf{S}\mathbf{e}_{2})_{i} - \gamma_{1} \boldsymbol{\beta}_{1}^{T} \boldsymbol{\beta}_{1} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}_{2}^{T} \mathbf{S} \boldsymbol{\beta}_{2},$$

$$\gamma_{1} = \lambda_{\min} \left(\mathbf{L}_{1} - \frac{\mathbf{S}}{2}\right) > 0.$$
(20)

Step 2. Finding the derivative of (11) and bringing (7), (8) and (12) into the derivative equation we obtain

$$\dot{\mathbf{e}}_2 = \dot{\mathbf{V}} - \dot{\boldsymbol{\alpha}} - \dot{\boldsymbol{\beta}}_2 = \mathbf{W}^T \boldsymbol{\varphi} + \boldsymbol{\delta} + \mathbf{B}(sat(\boldsymbol{\tau}) - \Delta \boldsymbol{\tau}) + \mathbf{d} - \dot{\boldsymbol{\alpha}} + \mathbf{L}_2 \boldsymbol{\beta}_2 =$$
$$= \mathbf{W}^T \boldsymbol{\varphi} + \boldsymbol{\delta} + \mathbf{B} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{d} - \dot{\boldsymbol{\alpha}} + \mathbf{L}_2 \boldsymbol{\beta}_2 \qquad (21)$$

and construct the Lyapunov function as

where

$$V_2 = V_1 + \sum_{i=1}^{3} \frac{b_{2i}^2}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{2i}^2}{2b_{2i}^2}\right) + \frac{1}{2} \beta_2^T \beta_2, \qquad (22)$$

where b_{2i} is a bound on the tracking error of the system whose values are discussed later; V_2 is a continuous function and it is greater than zero.

Differentiating (22), bringing (9), (21), (12) into function, and assuming (16) yields

$$\dot{V}_{2} = \dot{V}_{1} + \sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i} \dot{e}_{2i} + \boldsymbol{\beta}_{1}^{T} \dot{\boldsymbol{\beta}}_{1} =$$

$$= \dot{V}_{1} + \sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i} (\mathbf{W}^{T} \boldsymbol{\varphi} + \boldsymbol{\delta} + \mathbf{B} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{d} - \dot{\boldsymbol{\alpha}} + \mathbf{L}_{2} \boldsymbol{\beta}_{2})_{i} + (23)$$

$$+ \boldsymbol{\beta}_{1}^{T} (-\mathbf{L}_{2} \boldsymbol{\beta}_{2} + \mathbf{B} \Delta \boldsymbol{\tau}).$$

The derivatives of the virtual control rate can make the computation complicated and cause the differential explosion problem. In order to reduce the computational complexity, this paper uses the second-order sliding mode differentiator as a dynamic surface to calculate its derivative.

$$\dot{\xi}_{1} = -r_{1}|\xi_{1} - \alpha|^{\frac{1}{2}}sign(\xi_{1} - \alpha) + \xi_{2}, \dot{\xi}_{2} = -r_{2}sign(\xi_{1} - \alpha),$$
(24)

where $\xi_1 = (\xi_{11}, \xi_{12}, \xi_{13})^T$, $\xi_2 = (\xi_{21}, \xi_{22}, \xi_{23})^T$ are the state variables of the second-order filter; r_1 , r_2 are the system parameters; *sign*() is the sign function. According to reference [18], ξ_1 and $\dot{\xi}_1$ will converge to the virtual control

law α and its derivative $\dot{\alpha}$ respectively. When inputting signal with disturbances, the system will generate tracking errors ε and $|\xi_{1i} - \alpha_i| < \varepsilon_i$.

Design control torque is as

$$\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_{1} + \boldsymbol{\tau}_{2},$$

$$\boldsymbol{\tau}_{1} = \mathbf{B}^{-1} \left[\frac{-\mathbf{k}_{2} \mathbf{b}_{2}^{2} \sin\left(\frac{\pi \mathbf{e}_{2}^{2}}{\mathbf{b}_{2}^{2}}\right)}{2\pi \mathbf{e}_{2}} - \frac{\boldsymbol{\lambda}_{1}}{\boldsymbol{\lambda}_{2}} \mathbf{S} \mathbf{e}_{2} - \left(\mathbf{\hat{N}}_{1}^{T} \boldsymbol{\varphi}_{1} \\ \hat{\mathbf{W}}_{2}^{T} \boldsymbol{\varphi}_{2} \\ \hat{\mathbf{W}}_{3}^{T} \boldsymbol{\varphi}_{3} \right) + \boldsymbol{\xi}_{1} \right],$$

$$(25)$$

where $\mathbf{k}_2 = (k_{21}, k_{22}, k_{23})^T > 0$ is control gain; $\boldsymbol{\tau}_2$ as disturbance compensation term to be designed later.

Define the neural network parameter estimation error as

$$\tilde{\mathbf{W}}_i = \mathbf{W}_i - \hat{\mathbf{W}}_i, \tag{26}$$

where $\mathbf{\tilde{W}}_i$ is the parameter estimation error; $\mathbf{\hat{W}}_i$ is the estimated value of the parameter.

By taking (20), (24)–(26) into (23) we obtain

$$\dot{V}_{2} \leq \sum_{i=1}^{3} \left\{ -k_{1i} \frac{b_{1i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{1i}^{2}}{2b_{1i}^{2}}\right) \right\} + \sum_{i=1}^{3} \left\{ -k_{2i} \frac{b_{2i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{2i}^{2}}{2b_{2i}^{2}}\right) \right\} - \gamma_{1} \beta_{1}^{T} \beta_{1} - \beta_{2}^{T} \left(\mathbf{L}_{2} - \frac{\mathbf{S}}{2}\right) \beta_{2} +$$

$$(27)$$

$$+ \sum_{i=1}^{3} \left\{ \lambda_{2i} \left(\begin{pmatrix} \mathbf{W}_{1}^{T} \mathbf{\varphi}_{1} \\ \mathbf{\tilde{W}}_{2}^{T} \mathbf{\varphi}_{2} \\ \mathbf{\tilde{W}}_{3}^{T} \mathbf{\varphi}_{3} \end{pmatrix} + \mathbf{\delta} + \mathbf{B} \mathbf{\tau}_{2} + \mathbf{d} + \dot{\boldsymbol{\xi}}_{1} - \dot{\boldsymbol{\alpha}} \right)_{i} \right\} + \mathbf{\beta}_{1}^{T} \mathbf{B} \Delta \mathbf{\tau}.$$

Step 3. Select the Lyapunov function as

$$V_3 = V_2 + \frac{1}{2\rho_{i=1}^3} \tilde{\mathbf{W}}_i^T \tilde{\mathbf{W}}_i.$$
(28)

Taking the derivative of (28) and bringing (26), (27) into it yields

$$\dot{V}_{3} = \dot{V}_{2} - \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^{3} \widetilde{\mathbf{W}}_{i}^{T} \dot{\mathbf{W}}_{i} \leq \\ \leq \sum_{i=1}^{3} \left\{ -k_{1i} \frac{b_{1i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{1i}^{2}}{2b_{1i}^{2}}\right) \right\} + \sum_{i=1}^{3} \left\{ -k_{2i} \frac{b_{2i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{2i}^{2}}{2b_{2i}^{2}}\right) \right\} - \\ -\gamma_{1} \boldsymbol{\beta}_{1}^{T} \boldsymbol{\beta}_{1} - \boldsymbol{\beta}_{2}^{T} \left(\mathbf{L}_{2} - \frac{\mathbf{S}}{2}\right) \boldsymbol{\beta}_{2} +$$

$$\left(\left(\left(\tilde{\mathbf{W}}_{1}^{T} \boldsymbol{\theta}_{1} \right) \right) \right)$$

$$(29)$$

$$+\sum_{i=1}^{3} \left\{ \lambda_{2i} \left(\begin{pmatrix} \mathbf{W}_{1}^{T} \mathbf{\varphi}_{1} \\ \mathbf{\tilde{W}}_{2}^{T} \mathbf{\varphi}_{2} \\ \mathbf{\tilde{W}}_{3}^{T} \mathbf{\varphi}_{3} \end{pmatrix} + \mathbf{\delta} + \mathbf{B} \mathbf{\tau}_{2} + \mathbf{d} + \mathbf{\epsilon} \right)_{i} \right\} + \mathbf{\beta}_{1}^{T} \mathbf{B} \Delta \mathbf{\tau} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \mathbf{\tilde{W}}_{i}^{T} \dot{\mathbf{W}}_{i}.$$

According to Young's inequality, we obtain

$$\sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i} \delta_i \le \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i}^2 + \frac{1}{2} ||\boldsymbol{\delta}||^2 \le \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i}^2 + \frac{1}{2} \theta_{\delta}^2, \quad (30)$$

$$\sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i} d_i \le \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i}^2 + \frac{1}{2} \|\mathbf{d}\|^2 \le \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i}^2 + \frac{1}{2} \theta_d^2, \quad (31)$$

$$\sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i} \varepsilon_{i} \le \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i}^{2} + \frac{1}{2} ||\varepsilon||^{2} \le \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3} \lambda_{2i}^{2} + \frac{1}{2} \theta_{\varepsilon}^{2}, \quad (32)$$

$$\boldsymbol{\beta}_{1}^{T} \mathbf{B} \boldsymbol{\Delta \tau} \leq \frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}_{1}^{T} \boldsymbol{\beta}_{1} + \frac{1}{2} ||\mathbf{B}||^{2} ||\boldsymbol{\Delta \tau}||^{2} \leq \frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}_{1}^{T} \boldsymbol{\beta}_{1} + \frac{1}{2} ||\mathbf{B}||^{2} \boldsymbol{\theta}_{\boldsymbol{\Delta \tau}}^{2}.$$
 (33)

Then choosing the control law, we get adaptive control law

$$\boldsymbol{\tau}_2 = \mathbf{B}^{-1} \left(-\frac{3}{2} \lambda_2 \right), \tag{34}$$

$$\dot{\hat{\mathbf{W}}}_{i} = \rho(-\rho_{w}\hat{\mathbf{W}}_{i} + \lambda_{2i}\varphi_{i}), \qquad (35)$$

where ρ and ρ_w are the control gains.

Here, we can get the control law as

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{B}^{-1} \left[\frac{-\mathbf{k}_2 \mathbf{b}_2^2 \sin\left(\frac{\pi \mathbf{e}_2^2}{\mathbf{b}_2^2}\right)}{2\pi \mathbf{e}_2} - \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \mathbf{S} \mathbf{e}_2 - \mathbf{L}_2 \boldsymbol{\beta}_2 - \left(\frac{\hat{\mathbf{W}}_1^T \boldsymbol{\varphi}_1}{\hat{\mathbf{W}}_2^T \boldsymbol{\varphi}_2}\right) + \dot{\boldsymbol{\xi}}_1 - \frac{3}{2} \lambda_2 \right].$$

Bringing (30)-(35) into (29) yields

$$\dot{V}_{3} \leq \sum_{i=1}^{3} \left\{ -k_{1i} \frac{b_{1i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{1i}^{2}}{2b_{1i}^{2}}\right) \right\} + \sum_{i=1}^{3} \left\{ -k_{2i} \frac{b_{2i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{2i}^{2}}{2b_{2i}^{2}}\right) \right\} - \left. -\gamma_{1} \boldsymbol{\beta}_{1}^{T} \boldsymbol{\beta}_{1} - \gamma_{2} \boldsymbol{\beta}_{2}^{T} \boldsymbol{\beta}_{2} + \sum_{i=1}^{3} \rho_{w} \tilde{\mathbf{W}}_{i}^{T} \hat{\mathbf{W}}_{i} + \left. \left. (36\right) \right. \right. \\ \left. + \frac{1}{2} ||\mathbf{B}||^{2} \theta_{\Delta\tau}^{2} + \frac{1}{2} \left(\theta_{\delta}^{2} + \theta_{d}^{2} + \theta_{\varepsilon}^{2} \right), \right.$$
where $\gamma_{2} = \lambda_{min} \left(\mathbf{L}_{2} - \frac{\mathbf{S}}{2} \right) - \frac{1}{2} > 0.$

For
$$\sum_{i=1}^{3} \tilde{\mathbf{W}}_{i}^{T} \hat{\mathbf{W}}_{i}$$
, we have
 $\tilde{\mathbf{W}}_{i}^{T} \hat{\mathbf{W}}_{i} \leq -\frac{1}{2} \tilde{\mathbf{W}}_{i}^{T} \tilde{\mathbf{W}}_{i} + \frac{1}{2} \mathbf{W}_{i}^{T} \mathbf{W}_{i}.$ (37)

Bringing (37) into (36) gives

$$\begin{split} \dot{V}_{3} &\leq \sum_{i=1}^{3} \left\{ -k_{1i} \frac{b_{1i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{1i}^{2}}{2b_{1i}^{2}}\right) \right\} + \sum_{i=1}^{3} \left\{ -k_{2i} \frac{b_{2i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{2i}^{2}}{2b_{2i}^{2}}\right) \right\} - \\ &- \gamma_{1} \boldsymbol{\beta}_{1}^{T} \boldsymbol{\beta}_{1} - \gamma_{2} \boldsymbol{\beta}_{2}^{T} \boldsymbol{\beta}_{2} - \frac{1}{2} \rho_{w} \sum_{i=1}^{3} \tilde{\mathbf{W}}_{i}^{T} \tilde{\mathbf{W}}_{i} + \frac{1}{2} ||\mathbf{B}||^{2} \theta_{\Delta\tau}^{2} + \\ &+ \frac{1}{2} \left(\theta_{\delta}^{2} + \theta_{d}^{2} + \theta_{\epsilon}^{2} \right) + \sum_{i=1}^{3} \mathbf{W}_{i}^{T} \mathbf{W}_{i}. \end{split}$$

Let $a = \min\{\lambda_{\min}(\mathbf{k}_1), \lambda_{\min}(\mathbf{k}_2), 2\gamma_1, 2\gamma_2, \rho\rho_w\},\$

$$b = \frac{1}{2} ||\mathbf{B}||^2 \theta_{\Delta\tau}^2 + \frac{1}{2} \left(\theta_{\delta}^2 + \theta_d^2 + \theta_{\varepsilon}^2 \right) + \sum_{i=1}^3 \mathbf{W}_i^T \mathbf{W}_i,$$

then one has $\dot{V}_3 \le -aV_3 + b.$ (38)

Integrating (38) yields

$$V_3(t) \le \left(V_3(0) - \frac{b}{a}\right) \exp(-at) + \frac{b}{a} \le V_3(0) + \frac{b}{a}.$$
 (39)

According to equations (28) and (39), it is known that

$$\sum_{i=1}^{3} \left\{ \frac{b_{1i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{1i}^{2}}{2b_{1i}^{2}}\right) \right\} \leq V_{3}(t) \leq V_{3}(0) + \frac{b}{a},$$
$$\sum_{i=1}^{3} \left\{ \frac{b_{2i}^{2}}{\pi} \tan\left(\frac{\pi e_{2i}^{2}}{2b_{2i}^{2}}\right) \right\} \leq V_{3}(t) \leq V_{3}(0) + \frac{b}{a}.$$

Solving the equations obtains

$$|e_{1i}| \le \sqrt{\frac{2b_{1i}^2}{\pi} \arctan\left[\frac{\pi}{b_{1i}^2}\left(V_3(0) + \frac{b}{a}\right)\right]} < b_{1i},$$
$$|e_{2i}| \le \sqrt{\frac{2b_{2i}^2}{\pi} \arctan\left[\frac{\pi}{b_{2i}^2}\left(V_3(0) + \frac{b}{a}\right)\right]} < b_{2i}.$$

Obviously, the control algorithm designed in this paper can guarantee that the trajectory tracking errors stay within the constraints. From robot trajectory tracking errors (11) and (12), we can conclude that $|\mathbf{e}_1| = |\mathbf{q} - \mathbf{q}_r - \boldsymbol{\beta}_1| \le \mathbf{b}_1$, $|\mathbf{e}_2| = |\mathbf{V} - \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\beta}_2| \le \mathbf{b}_2$. When the initial state of the system satisfies the limits $|\mathbf{q}(0) - \mathbf{q}_r(0) - \boldsymbol{\beta}_1(0)| \le \mathbf{b}_1$, $|\mathbf{V}(0) - \boldsymbol{\alpha}(0) - \boldsymbol{\beta}_2(0)| \le \mathbf{b}_2$, the system will operate within the specified error range, then the states of the system will satisfy the inequality $|\mathbf{q}| \le |\mathbf{b}_1| + |\mathbf{q}_r| + |\mathbf{\beta}_1|$, $|\mathbf{V}| \le |\mathbf{b}_2| + |\boldsymbol{\alpha}| + |\boldsymbol{\beta}_2|$.

Now we discuss the problem of system boundary selection. It can be known from assumption 5 and 6 that $|\beta_{1i}| < \eta_{1i}, |\beta_{2i}| < \eta_{2i}, |q_{ri}| < p_{1i}, |V_{ri}| < p_{2i}, |q_i| < y_{1i}, |V_i| < y_{2i}$, and we've proved that $|e_{1i}| < b_{1i}, |e_{2i}| < b_{2i}$. According to definition (11), we get $|q_i| \le |e_{1i}| + |q_{ri}| + |\beta_{1i}| < b_{1i} + p_{1i} + \eta_{1i}$, when choosing $b_{1i} = y_{1i} - p_{1i} - \eta_{1i}$, the state of the system will satisfy the boundary condition $|q_i| < y_{1i}$. Similarly, from definition (12) one has $|V_i| \le |e_{2i}| + |\alpha_i|_{max} + |\beta_{2i}| < b_{2i} + |\alpha_i|_{max} + \eta_{2i}$, where $|\alpha_i|_{max}$ is the maximum of virtual control law. When choosing $b_{2i} = y_{2i} - |\alpha_i|_{max} - \eta_{2i}$, the speed of robot will satisfy the boundary condition $|V_i| < y_{2i}$.

Numerical simulation

In this section, simulation experiment demonstrates the effectiveness of the controller proposed in this paper. The parameters of the robot are chosen as m = 9 kg, L = 0.4 m, r = 0.05 m, $I_V = 11$ kg·m², $I_w = 0.05$ kg·m², c = 0.02 kg·m²/s. The reference trajectory is $q_{r1} =$ $= 1.5 \sin(0.1t)$ m, $q_{r2} = \sin(0.2t)$ m, $q_{r3} = \sin(0.1t)$ rad. The control gains are $\mathbf{k}_1 = (0.5, 0.5, 0.5)^T$, $\mathbf{k}_2 = (0.1, 0.1, 0.1)^T$. The dynamic surface parameters are chosen as $r_1 = 1.1$, $r_2 = 1.1$. The parameters of the auxiliary system are $L_1 = = diag(20, 20, 20)$, $L_2 = diag(20, 20, 20)$.

The boundaries of the tracking errors are chosen as $\mathbf{b}_1 = (0.5, 0.5, 0.5)^T$, $\mathbf{b}_2 = (0.5, 0.5, 0.5)^T$. The neural network with 11 nodes, the center is selected to be uniformly distributed in the interval [-1, 1], and the width is 2. The adaptive gains are $\rho = \rho_w = 2$. The initial values for each system are chosen as $\mathbf{q}(0) = (0.4, -0.4, 0.3)^T$, $\mathbf{V}(0) = (0.1, 0.1, 0.1)^T$, $\mathbf{W}_i(0) = zeros(11.1)$, $\boldsymbol{\beta}_1 = (0, 0, 0)^T$, $\boldsymbol{\beta}_2 = (0, 0, 0)^T$. The external disturbance on the robot is $d_1 = 0.01\sin(t)$, $d_2 = 0.01\sin(2t)$, $d_3 = 0.01\sin(t)$. The saturation input is limited to $\tau_{\text{max}} = 300 \text{ N} \cdot \text{m}$.

The results of the experiment can be summarized as follows: Fig. 2 shows the whole motion of the robot; Fig. 3, Fig. 4 show the robot position and velocity following respectively; Fig. 5 shows the errors of robot position and velocity; Fig. 6 gives the estimated output of the dynamic surface; Fig. 7 presents the saturation control torque $sat(\tau)$.

The experimental results demonstrate that the control algorithm proposed in this paper can enable the robot to trace the reference trajectory with the given initial conditions. The robot system states \mathbf{q} and \mathbf{V} can gradually converge to the given states by satisfying the defined constraints; the position error and velocity error are able to be gradually stabilized in a smaller region near zero. The saturation control input guarantees that the control torque does not exceed the maximum output of the motor.



Fig. 2. The trajectory of robot



Fig. 3. Comparison between \mathbf{q} and \mathbf{q}_r

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6







Fig. 5. Trajectory tracking error and speed tracking error



Fig. 6. The output of dynamic surface





Conclusion

In this paper, we focus on the trajectory tracking motion of a three-wheeled omnidirectional mobile robot with full state constraints and the presence of output saturation of the driving motors. Firstly, we analyze the kinematic and dynamic models of the three-wheeled omnidirectional mobile robot. The model of the robot with actuator saturation is given. When designing the controller, we adopt tan-type barrier Lyapunov function and backstepping method. This ensures that the system full states will not violate the given constraints when the robot is performing trajectory tracking. Considering the differential explosion problem, which occurs in solving the derivatives of the virtual control law, we use a second-order differential sliding mode surface to calculate it, so as to reduce the complexity of the operation. In addition, due to the output saturation problem of the robot drive motor, we build an auxiliary compensation system to compensate the error generated by the saturation function. It eliminates the

References

- Kramer J., Scheutz M. Development environments for autonomous mobile robots: A survey. *Autonomous Robots*, 2007, vol. 22, no. 1, pp. 101–132. https://doi.org/10.1007/s10514-006-9013-8
- Watanabe K., Shiraishi Y., Tzafestas S.G., Tang J., Fukuda T. Feedback control of an omnidirectional autonomous platform for mobile service robots. *Journal of Intelligent and Robotic Systems*, 1998, vol. 22, pp. 315–330. https://doi.org/10.1023/A:1008048307352
- Kalmár-Nagy T., D'Andrea R., Ganguly P. Near-optimal dynamic trajectory generation and control of an omnidirectional vehicle. *Robotics and Autonomous Systems*, 2003, vol. 46, no. 1, pp. 47–64. https://doi.org/10.1016/j.robot.2003.10.003
- Liu Y., Zhu J.J., Williams R.L. II, Wu J. Omni-directional mobile robot controller based on trajectory linearization. *Robotics and autonomous Systems*, 2008, vol. 56, no. 5, pp. 461–479. https://doi. org/10.1016/j.robot.2007.08.007
- Huang H.C., Tsai C.C. Adaptive trajectory tracking and stabilization for omnidirectional mobile robot with dynamic effect and uncertainties. *IFAC Proceedings Volumes*, 2008, vol. 41, no. 2, pp. 5383–5388. https://doi.org/10.3182/20080706-5-KR-1001.00907
- Alakshendra V., Chiddarwar S.S. Adaptive robust control of Mecanum-wheeled mobile robot with uncertainties. *Nonlinear Dynamics*, 2017, vol. 87, no. 4, pp. 2147–2169. https://doi. org/10.1007/s11071-016-3179-1
- 7. Lu X., Zhang X., Zhang G., Fan J., Jia S. Neural network adaptive sliding mode control for omnidirectional vehicle with uncertainties.

influence of input saturation on the robot trajectory tracking accuracy. Finally, an experimental simulation is performed in MATLAB, and the simulation results illustrate the effectiveness of the control algorithm proposed in this paper.

- 1. However, there are still some places that need to be improved for the study in this paper. The algorithm proposed in this paper can only ensure that the system error converges to zero asymptotically. Robots often need to realize trajectory tracking quickly in practical application. For this reason, the controller can be further improved to converge to zero at a specified time.
- 2. Due to the RBFNN, the dynamic surface and the saturation function generate output errors that affect the robot tracking accuracy. This paper only partially compensates for the disturbance, and does not completely eliminate the affect generated by the error. It can be further improved by estimating the upper bound of the error by adaptive algorithms to further reduce the perturbation of the error.

Литература

- Kramer J., Scheutz M. Development environments for autonomous mobile robots: A survey // Autonomous Robots. 2007. V. 22. N 1. P. 101–132. https://doi.org/10.1007/s10514-006-9013-8
- Watanabe K., Shiraishi Y., Tzafestas S.G., Tang J., Fukuda T. Feedback control of an omnidirectional autonomous platform for mobile service robots // Journal of Intelligent and Robotic Systems. 1998. V. 22. P. 315–330. https://doi.org/10.1023/A:1008048307352
- Kalmár-Nagy T., D'Andrea R., Ganguly P. Near-optimal dynamic trajectory generation and control of an omnidirectional vehicle // Robotics and Autonomous Systems. 2003. V. 46. N 1. P. 47–64. https://doi.org/10.1016/j.robot.2003.10.003
- Liu Y., Zhu J.J., Williams R.L. II, Wu J. Omni-directional mobile robot controller based on trajectory linearization // Robotics and autonomous Systems. 2008. V. 56. N 5. P. 461–479. https://doi. org/10.1016/j.robot.2007.08.007
- Huang H.C., Tsai C.C. Adaptive trajectory tracking and stabilization for omnidirectional mobile robot with dynamic effect and uncertainties // IFAC Proceedings Volumes. 2008. V. 41. N 2. P. 5383– 5388. https://doi.org/10.3182/20080706-5-KR-1001.00907
- Alakshendra V., Chiddarwar S.S. Adaptive robust control of Mecanum-wheeled mobile robot with uncertainties // Nonlinear Dynamics. 2017. V. 87. N 4. P. 2147–2169. https://doi.org/10.1007/ s11071-016-3179-1
- Lu X., Zhang X., Zhang G., Fan J., Jia S. Neural network adaptive sliding mode control for omnidirectional vehicle with uncertainties //

ISA Transactions, 2019, vol. 86, pp. 201–214. https://doi. org/10.1016/j.isatra.2018.10.043

- Zijie N., Qiang L., Yonjie C., Zhijun S. Fuzzy control strategy for course correction of omnidirectional mobile robot. *International Journal of Control, Automation and Systems*, 2019, vol. 17, no. 9, pp. 2354–2364. https://doi.org/10.1007/s12555-018-0633-5
- Tee K.P., Ge S.S., Tay E.H. Barrier Lyapunov functions for the control of output-constrained nonlinear systems. *Automatica*, 2009, vol. 45, no. 4, pp. 918–927. https://doi.org/10.1016/j.automatica.2008.11.017
- Xi C., Dong J. Adaptive neural network-based control of uncertain nonlinear systems with time-varying full-state constraints and input constraint. *Neurocomputing*, 2019, vol. 357, pp. 108–115. https://doi. org/10.1016/j.neucom.2019.04.060
- Ding L., Li S., Liu Y.J., Gao H., Chen C., Deng Z. Adaptive neural network-based tracking control for full-state constrained wheeled mobile robotic system. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics: Systems*, 2017, vol. 47, no. 8, pp. 2410–2419. https:// doi.org/10.1109/TSMC.2017.2677472
- Dong C., Liu Y., Wang Q. Barrier Lyapunov function based adaptive finite-time control for hypersonic flight vehicles with state constraints. *ISA Transactions*, 2020, vol. 96, pp. 163–176. https://doi. org/10.1016/j.isatra.2019.06.011
- Doyle J.C., Smith R.S., Enns D.F. Control of plants with input saturation nonlinearities. *American Control Conference*, IEEE, 1987, pp. 1034–1039. https://doi.org/10.23919/ACC.1987.4789464
- 14. Mofid O., Mobayen S. Adaptive finite-time backstepping global sliding mode tracker of quad-rotor UAVs under model uncertainty, wind perturbation, and input saturation. *IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems*, 2022, vol. 58, no. 1, pp. 140–151. https://doi.org/10.1109/TAES.2021.3098168
- Chen X., Jia Y., Matsuno F. Tracking control for differential-drive mobile robots with diamond-shaped input constraints. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 2014, vol. 22, no. 5, pp. 1999–2006. https://doi.org/10.1109/TCST.2013.2296900
- Yang C., Huang D., He W., Cheng L. Neural control of robot manipulators with trajectory tracking constraints and input saturation. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2021, vol. 32, no. 9, pp. 4231–4242. https://doi.org/10.1109/ TNNLS.2020.3017202
- Gao Y.-F., Sun X.-M., Wen C., Wang W. Adaptive tracking control for a class of stochastic uncertain nonlinear systems with input saturation. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2017, vol. 62, no. 5, pp. 2498–2504. https://doi.org/10.1109/TAC.2016.2600340
- Levant A. Higher-order sliding modes, differentiation and outputfeedback control. *International Journal of Control*, 2003, vol. 76, no. 9-10, pp. 924–941. https://doi.org/10.1080/0020717031000099029

Authors

Chen Zhiqiang — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, sc 58181996400, https://orcid.org/0009-0007-6813-2287, Snowchen612@outlook.com

Aleksandr Yu. Krasnov — PhD, Lecturer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, sc 55355811700, https://orcid. org/0000-0001-6026-6706, aykrasnov@itmo.ru

Liao Duzhesheng — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, sc 57211507575, https://orcid.org/0009-0000-6389-1355, ldzs2015@gmail.com

Yang Qiusheng — Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0009-0007-5839-0258, 1799797481@qq.com

Received 02.10.2023 Approved after reviewing 08.11.2023 Accepted 25.11.2023 ISA Transactions. 2019. V. 86. P. 201–214. https://doi.org/10.1016/j. isatra.2018.10.043

- Zijie N., Qiang L., Yonjie C., Zhijun S. Fuzzy control strategy for course correction of omnidirectional mobile robot // International Journal of Control, Automation and Systems. 2019. V. 17. N 9. P. 2354–2364. https://doi.org/10.1007/s12555-018-0633-5
- Tee K.P., Ge S.S., Tay E.H. Barrier Lyapunov functions for the control of output-constrained nonlinear systems // Automatica. 2009. V. 45. N 4. P. 918–927. https://doi.org/10.1016/j.automatica.2008.11.017
- Xi C., Dong J. Adaptive neural network-based control of uncertain nonlinear systems with time-varying full-state constraints and input constraint // Neurocomputing. 2019. V. 357. P. 108–115. https://doi. org/10.1016/j.neucom.2019.04.060
- Ding L., Li S., Liu Y.J., Gao H., Chen C., Deng Z. Adaptive neural network-based tracking control for full-state constrained wheeled mobile robotic system // IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics: Systems. 2017. V. 47. N 8. P. 2410–2419. https://doi. org/10.1109/TSMC.2017.2677472
- Dong C., Liu Y., Wang Q. Barrier Lyapunov function based adaptive finite-time control for hypersonic flight vehicles with state constraints // ISA Transactions. 2020. V. 96. P. 163–176. https://doi.org/10.1016/j. isatra.2019.06.011
- Doyle J.C., Smith R.S., Enns D.F. Control of plants with input saturation nonlinearities // American Control Conference. IEEE, 1987. P. 1034–1039. https://doi.org/10.23919/ACC.1987.4789464
- Mofid O., Mobayen S. Adaptive finite-time backstepping global sliding mode tracker of quad-rotor UAVs under model uncertainty, wind perturbation, and input saturation // IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems. 2022. V. 58. N 1. P. 140–151. https://doi.org/10.1109/TAES.2021.3098168
- Chen X., Jia Y., Matsuno F. Tracking control for differential-drive mobile robots with diamond-shaped input constraints // IEEE Transactions on Control Systems Technology. 2014. V. 22. N 5. P. 1999–2006. https://doi.org/10.1109/TCST.2013.2296900
- Yang C., Huang D., He W., Cheng L. Neural control of robot manipulators with trajectory tracking constraints and input saturation // IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems. 2021. V. 32. N 9. P. 4231–4242. https://doi.org/10.1109/ TNNLS.2020.3017202
- Gao Y.-F., Sun X.-M., Wen C., Wang W. Adaptive tracking control for a class of stochastic uncertain nonlinear systems with input saturation // IEEE Transactions on Automatic Control. 2017. V. 62. N 5. P. 2498–2504. https://doi.org/10.1109/TAC.2016.2600340
- Levant A. Higher-order sliding modes, differentiation and outputfeedback control // International Journal of Control. 2003. V. 76. N 9-10. P. 924–941. https://doi.org/10.1080/0020717031000099029

Авторы

Чжицян Чэнь — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, sc 58181996400, https://orcid.org/0009-0007-6813-2287, Snowchen612@outlook.com

Краснов Александр Юрьевич — кандидат технических наук, преподаватель, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, sc 55355811700, https://orcid.org/0000-0001-6026-6706, aykrasnov@itmo.ru

Дучжешэн Ляо — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, sc 57211507575, https://orcid.org/0009-0000-6389-1355, ldzs2015@gmail.com

Цюшэн Ян — студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid.org/0009-0007-5839-0258, 1799797481@qq.com

Статья поступила в редакцию 02.10.2023 Одобрена после рецензирования 08.11.2023 Принята к печати 25.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» VITMO

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

NHOOPMAUNOHHIJIX TEXHONOFINÄ, MEXAHNKN N ONTUKN

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ MATERIAL SCIENCE AND NANOTECHNOLOGIES

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1106-1113 УДК 53.082.54

Двухдлинноволновая цифровая голографическая интерферометрия в технических приложениях

Игорь Вячеславович Алексеенко¹, Анастасия Михайловна Кожевникова²

^{1,2} Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация

¹ IAlekseenko@kantiana.ru^{\equiv}, https://orcid.org/0000-0001-8463-3304

² AKozhevnikova1@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0002-6642-5226

Аннотация

Введение. Исследован метод двухдлинноволновой цифровой голографической интерферометрии анализа и контроля формы поверхности для технических приложений. Данный метод является бесконтактным и применим для поверхностей, которые подвержены воздействию, в том числе высокотемпературной плазмы в термоядерных реакторах. Показана возможность применения метода с использованием перестраиваемых по длине волны лазеров и миниатюрных вертикально-излучающих диодов. Метод. В основе метода лежит двухдлинноволновая (длины волн 854,000-854,082 нм и 779,900-779,870 нм) цифровая голографическая интерферометрия. Для получения информации о форме объекта выполняется сравнение фазы отраженных от объекта волновых фронтов, зарегистрированных на разных длинах волн. Чувствительность метода определяется величиной синтетической длины волны, которая равна разности длин волн, используемых при записи цифровых первичных голограмм. Основные результаты. Показана возможность применения в рассматриваемом методе вертикальноизлучающих диодов (Vertical-Cavity Surface-Emitting Laser, VCSEL) в качестве когерентного источника лазерного излучения. Установлено, что VCSEL имеют длину когерентности около 20 см, а длина волны излучения линейно зависит от величины проходящего тока. Продемонстрирована стабильность длины волны излучения в пределах 1 % в течение 24 часов непрерывной работы. Показаны возможности метода двухдлинноволновой голографической интерферометрии для измерения формы объектов на примерах элемента кузова автомобиля и защитного элемента внутренней стенки реактора Токамак. Обсуждение. Результаты исследований подтвердили возможность применения техники двухдлинноволновой голографической интерферометрии для измерения формы поверхности технических объектов различного типа. Известный и широко применяемый метод проекции полос недостаточно надежно работает на слабо рассеивающих или зеркально отражающих поверхностях. Использование известной системы Лидар требует проводить сканирование поверхности в течение определенного промежутка времени, что при нестабильности объекта (механические перемещения, вибрации) может приводить к ошибкам измерений. В отличие от данных методов исследованный метод позволяет повысить точность измерений за счет малого времени экспозиции камеры (миллисекунды, микросекунды или с использованием импульсов до 10 нс). Недостатком метода двухдлинноволновой голографической интерферометрии является зависимость взаимной корреляции спекл-структур на голограммах от разности длин волн. Для увеличения чувствительности метода необходимо увеличивать эту разность, что ухудшает соотношение сигнал-шум и снижает точность полученных данных.

Ключевые слова

цифровая голографическая интерферометрия, двухдлинноволновая интерферометрия, определение формы поверхности, вертикально-излучающие диоды, цифровая обработка изображений, оптический неразрушающий контроль

Благодарности

Статья представлена в рамках работы над грантом РНФ № 23-79-00023 «Оптический неразрушающий контроль и диагностика первой стенки Токамак-реакторов с использованием метода двухдлинноволновой цифровой голографической интерферометрии и системы лазерного сканирования».

Ссылка для цитирования: Алексеенко И.В., Кожевникова А.М. Двухдлинноволновая цифровая голографическая интерферометрия в технических приложениях // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1106–1113. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1106-1113

[©] Алексеенко И.В., Кожевникова А.М., 2023

Dual-wavelength digital holographic interferometry for technical applications Igor V. Alekseenko^{1⊠}, Anastasiia M. Kozhevnikova²

1,2 Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation

¹ IAlekseenko@kantiana.ru[⊠], https://orcid.org/0000-0001-8463-3304

² AKozhevnikova1@kantiana.ru, https://orcid.org/0000-0002-6642-5226

Abstract

A method of dual-wavelength digital holographic interferometry for analyzing and controlling surface shape for technical applications, including surfaces exposed to high-temperature plasma in fusion reactors, is presented. The capability of applying the method both using miniature vertical-emitting diodes (VCSEL) and conventional wavelength-tunable lasers is shown. The research method is based on dual-wavelength digital holographic interferometry, in which the phases of wave fronts reflected from the object detected at different wavelengths are compared to provide information about the shape of the object. Moreover, the sensitivity of the method is determined by the value of synthetic wavelength, which depends on the difference of wavelengths used for acquisition of digital holograms. The method used following wavelengths 854.000-854.082 nm and 779.900-779.870 nm. Implementation of vertical-emitting diodes for dual-wave holographic interferometry methods is shown. It is found that such diodes have a coherence length of about 20 cm and similar to He-Ne laser. The dependence of the emission wavelength of such sources on the current has been examined and it is determined that the output wavelength deviates less than 1 % during 24 hours. The application of the holographic method has been demonstrated for measuring the shape of objects used in various technical applications (a car body part and a shielding element of the internal wall of the Tokamak fusion reactor). The results of the research illustrate the opportunity to apply the technique of dual-wavelength holographic interferometry to measure a shape of the technical objects surface of various types. It should be noted that other method such as fringe projection can also be used to solve such problems, but it does not work sufficiently on low-scattering surfaces, in our case the lacquered surface of the car body, or specular reflecting surfaces. In addition, the LIDAR technique requires scanning the surface over time, which can lead to measurement errors if the object is unstable due to mechanical movements or vibrations. In dualwavelength holographic interferometry such drawbacks can be reduced by short camera exposure times of milliseconds/ microseconds, or by using pulse laser with pulse durations of 10 ns. However, the major disadvantage of the method is the dependence of the mutual correlation of speckle structures of holograms on the wavelength difference. In order to increase the sensitivity of the method, it is necessary to increase this wavelength difference, and this can significantly reduce the signal-to-noise ratio and decrease the accuracy of the obtained data.

Keywords

digital holographic interferometry, digital holography, optical non-destructive testing

Acknowledgements

This article is performed in accordance with the support of the Russian Science Foundation (RSF), Project No. 23-79-00023 "Optical Nondestructive Testing and Diagnostics of the First Wall of Tokamak Reactors Using Dual-Wavelength Digital Holographic Interferometry and Lidar" for the years 2023–2026.

For citation: Alekseenko I.V., Kozhevnikova A.M. Dual-wavelength digital holographic interferometry for technical applications. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1106–1113 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1106-1113

Введение

Методы цифровой голографической интерферометрии относятся к высокочувствительным и бесконтактным методам оптического контроля [1-7]. В частности, двухдлинноволновая цифровая голографическая интерферометрия с методом, который позволяет проводить измерение и оценку формы поверхности исследуемого объекта [8-10]. В настоящее время с развитием технологий усиливаются требования к точности и уровню контроля на разных этапах производства изделий любого рода, в том числе при создании сложных научных комплексов, в которых необходим дистанционный контроль поверхности. При этом для применения метода двухдлинноволновой голографической интерферометрии необходимы когерентные источники электромагнитного излучения (лазеры) с перестраиваемой длиной волны. Сегодня возможно использование как достаточно мощных источников лазерного излучения в диапазоне от сотен милливатт, так и маломощных не более 1 мВт, у которых перестройка длины волны излучения варьируется в диапазоне 2 нм. Также такие источники излучения могут быть реализованы

как излучающие диоды с хорошей спектральной стабильностью, что позволяет реализовать достаточно компактные интерференционные схемы регистрации голограмм. В настоящей работе рассматривается реализация метода двухдлинноволновой голографической интерферометрии с использованием миниатюрных вертикально-излучающих диодов (Vertical-Cavity Surface-Emitting Laser, VCSEL) и обычной лазерной системы с перестраиваемой длиной волны на основе монокристалла сапфира с примесью ионов титана. Применение вертикально-излучающих диодов позволяет, например, применить интерференционный метод в автомобильной промышленности для контроля сочетающихся между собой элементов кузова автомобиля в условиях конвейерной сборки. Титан-сапфировый лазер применен как основное средство для исследования элементов, обращенных к плазме Токамак-реактора. Показана потенциальная возможность применения данного лазера для контроля формы и деградации элементов в реакторе. Известно, что обращенные к плазме элементы первой стенки реактора претерпевают высокие тепловые нагрузки и сдерживают прорыв плазмы из камеры Токамак [11, 12]. Прорыв же плазмы может привести

к разрушению реактора. Таким образом, дистанционный контроль элементов первой стенки необходим для обеспечения безопасности при эксплуатации такого сложного комплекса.

Используемые методы и подходы

Основу метода составляет сравнение фаз оптических волновых полей, зарегистрированных и восстановленных с помощью техники цифровой голографической интерферометрии [13]. Голограммы как результат интерференции объектного (изображения исследуемого объекта) и опорного полей регистрируются на цифровую камеру высокого разрешения. При этом запись голографических изображений осуществлена для каждой отдельной длины волны последовательно или одновременно.

Расчет фазы объектной волны выполнен с использованием преобразования Фурье.

Отметим, что использование преобразования Фурье для зарегистрированной интенсивности позволяет разделить в области пространственных частот интенсивности опорного $|R_H(x, y)|^2$ и объектного $|U_H(x, y)|^2$ полей, а также распределение объектного поля $R_H^*(x, y) \times U_H(x, y)$. Операция фильтрации и использование обратного преобразования Фурье над полем $FFT^{-1}(R_H^*(x, y) \times U_H(x, y))$ позволяет восстановить его фазовое распределение.

Распределение фаз для двух объектных полей $U_{H1}(x, y)$ и $U_{H2}(x, y)$, соответствующих двум различным состояниям, опишем выражением [14]

$$\Delta \varphi(x, y) = \arg[e^{-i(\varphi_{H2}(x,y) - \varphi_{H1}(x,y))}].$$

В случае регистрации голографических изображений на разных длинах волн восстановленная разность фаз будет соответствовать форме исследуемого объекта. Например, если направления освещения и наблюдения объекта перпендикулярны его поверхности, то для рассчитанной разности фаз в 2π изменение профиля поверхности объекта определим выражением [15]:

$$\Delta z = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2|\lambda_1 - \lambda_2|} = \frac{\Lambda}{2},\tag{1}$$

где λ_1 и λ_2 — длины волн, используемые для записи голограмм; Λ — синтетическая длина волны.

Важное преимущество исследуемого метода — возможность изменения чувствительности метода путем изменения разности длин волн.

Запишем две голограммы на разных длинах волн одновременно или последовательно с использованием одного или двух лазеров, перестраиваемых по длине волны. Следует обратить внимание на особенности одновременной или последовательной регистрации голограмм. Например, при последовательной регистрации достаточно использовать только один источник лазерного излучения, что существенно удешевляет и упрощает конфигурацию оптической схемы голографического интерферометра. Однако такая система чувствительна к механическим возмущениям исследуемого объекта в реальных условиях измерений [16]. Тем не менее, в лаборатории при наличии системы виброизоляции данная конфигурация достаточно надежна и может быть использована для поиска оптимальных условий регистрации голографических изображений, повышения отношения сигнал-шум или определения порога чувствительности измерения для различных исследуемых поверхностей.

Конфигурация с одновременной регистрацией голограмм требует использования двух независимых лазеров, что может привести к существенному удорожанию измерительного комплекса. В рамках развития метода контроля формы поверхности данная конфигурация является более оптимальной по следующим причинам: взаимная нечувствительность к механическим возмущениям объекта, что исключает возникновение дополнительного ненужного набега фаз; возможность одновременной перестройки длин волн с последующей регистрацией голограмм; уменьшение времени захвата двух изображений. На рис. 1 представлена обобщенная схема регистрации голограмм. В качестве источника когерентного излучения можно использовать титан-сапфировый лазер, или два VCSEL для одновременной регистрации голограмм на разных длинах волн.

Основные результаты и обсуждение

В настоящей работе применены две возможные технические реализации метода двухдлинноволновой голографической интерферометрии. В первой использованы вертикально-излучающие диоды с перестраиваемой длиной волны для демонстрации применения техники в контроле стыкующихся частей кузова автомобиля. Для подобного типа лазерных диодов изменение длины волны осуществлено путем изменения тока. На рис. 2, а показан использованный лазерный диод компании Priolas GmbH (Германия). Установлено, что зависимость длины волны излучения линейно связана с изменением тока на VCSEL-диодах и имеет высокую стабильность во времени. На рис. 2, b показаны калибровочные графики зависимостей длины волны от тока диода. Две калибровочные прямые сделаны с разницей в одни сутки. Отметим, что разница значений полученных прямых составляет меньше 1 %.

Дополнительно установлено, что излучение VCSELдиодов имеет высокую спектральную стабильность [17] и определяет длину когерентности в диапазоне 20 см. Максимальное изменение длины волны такого диода может варьироваться в пределах 2 нм, что согласно выражению (1) обеспечивает разность фаз в 2π радиан для высоты профиля 180 мкм и определяет максимальную рабочую чувствительность метода.

Для проверки метода проведены измерения ступенек профиля высотами 1 мм и 2 мм с использованием стандартов высоты, погрешность которых составила $\pm 0,4\mu$. При регистрации голограмм применена конфигурация с одновременной записью изображений на двух разных длинах волн, которые устанавливались согласно калибровочным прямым (рис. 2, *b*). Время экспозиции камеры составило 15 мс, синтезированная длина волны — 8 мм. На рис. 3, *a* показан эталон, по которому



Рис. 1. Схема регистрации цифровых голограмм на двух различных длинах волн (λ_1 и λ_2): ПК — персональный компьютер *Fig. 1.* Experimental setup for the hologram acquisition



Puc. 2. Изображение вертикально-излучающего диода (*a*) и зависимости длины волны излучения от тока лазерного диода (*b*) *Fig.* 2. Image (*a*) and emission wavelength versus current (*b*) of a vertical emitting diode



Рис. 3. Ступенчатый профиль, выполненный по стандартам высоты (*a*) и величина профиля, измеренная с помощью голографического метода (*b*)

Fig. 3. Step-profile of height gauges (a), topography value measured by holography (b)

проведены измерения, а на рис. 3, *b* — измеренный профиль эталона.

Рассмотрим полученные результаты определения перепада уровней элементов кузова автомобилей, окрашенных в различные цвета. На рис. 4, a показан элемент макета регистрации, измеряемый объект и область измерения (выделена желтым прямоугольником), а на рис. 4, b — результат измерения профиля двух согласованных поверхностей. Размер области измерения $10 \times 10 \text{ мм}^2$.

Результаты измерений продемонстрировали возможность применения VCSEL в методе двухдлинноволновой цифровой голографической интерферометрии для технических приложений на примере контроля пространственного сочетания элементов кузова автомобиля между собой.

Второй подход для реализации техники двухдлинноволновой голографической интерферометрии — использование одночастотного непрерывного титан-сапфирового лазера в ближнем инфракрасном диапазоне длин волн 700-800 нм марки Matisse от компании Sirah (Германия). В данной конфигурации осуществлена последовательная регистрация голограмм на разных длинах волн. Однако интерес представляет использование двухдлинноволновой голографической интерферометрии для оптического неразрушающего контроля обращенных к плазме элементов Токамак. Отметим, что контроль таких элементов требует техники, исключающей вскрытие камеры реактора. Таким образом, методы оптического неразрушающего контроля, которые могут предоставить данные в виде оптического сигнала, зарегистрированного на достаточном удалении от измеряемого объекта и без установки датчиков на нем, являются оптимальными.

Выполним анализ результатов измерений профиля элемента защитной оболочки Токамак-реактора мето-

дом двухдлинноволновой голографической интерферометрии. На рис. 5, а показан элемент такой оболочки, изготовленный из вольфрама. Изучим возможность оценки профиля исследуемых элементов методом оптического неразрушающего контроля (голографической интерферометрии). Две голограммы последовательно регистрировались на двух длинах волн $\lambda_1 = 779,900$ нм, $\lambda_2 = 779,870$ нм, что соответствует синтезированной длине волны $\Lambda = 20$ мм. Определение длины волны проведено с помощью измерителя Burleigh Instruments WA-1000 (Великобритания). В результате анализа полученных интерферограмм доказано, что возможно построение формы поверхности. На рис. 5, *b* показано фазовое распределение, соответствующее профилю объекта, а на рис. 5, c — реконструированное трехмерное распределение формы защитного элемента [18].

Известно, что для повышения чувствительности метода двухчастотного оконтуривания необходимо увеличение разности длин волн, используемых при регистрации. Однако это приводит к уменьшению взаимной корреляции волновых полей, что ухудшает распределение разности фаз. Такой эффект сильно зависит от степени шероховатости и слабо влияет на результат для зеркальных поверхностей. Однако в случае диффузно-отражающих поверхностей уменьшение взаимной корреляции спекл-структур приводит к уменьшению соотношения сигнал-шум для фазового распределения на интерферограмме или к потере информации в случае их полной декорреляции [19].

Дополнительно заметим, что имеются особенности использования схемы с одновременной регистрацией голограмм на разных длинах волн. В такой конфигурации схемы регистрации возникает сложение интенсивностей объектных полей, что в случае большой интенсивности излучения может привести к перезасветке детектора изображений и потере информации.

a b www.bruchodin ecosystem b b construction b construction const



Fig. 4. Non-cooperative surfaces and measurement results setup (*a*) with non-cooperative surfaces (yellow square is $10 \times 10 \text{ mm}^2$ measurement area); (*b*) is topography cross-section plot (blue line is the measured profile, red is the averaged value along the profile)


а

Рис. 5. Защитный элемент внутренней стенки Токамак-реактора (*a*); фазовое (*b*) и трехмерное (*c*) распределения профиля исследуемого объекта

Fig. 5. Protective element of the inner wall of the Tokamak reactor (*a*); phase (*b*) and three-dimensional (*c*) profile distributions of the object under study

Тем не менее, схема с одновременной регистрацией характеризуется большей стабильностью и гибкостью в управлении за счет использования двух независимых источников лазерного излучения.

Заключение

В работе показана возможность применения метода двухдлинноволновой цифровой голографической интерферометрии для контроля формы поверхности различных по классу технических объектов. Продемонстрировано использование не только обычных лазерных систем с перестраиваемой длиной волны, но и компактных вертикально-излучающих диодов (VCSEL), у которых изменение длин волн осуществлено изменением тока лазерного диода. Показано, что VCSEL-структуры обладают высокой спектральной стабильностью, что определяет большую, по сравнению с обычными лазерными диодами, временную когерентность излучения. Соответствующая длина когерентности оценена в 20 см и сравнима с обычными лазерами (HeNe, HeCd, Ti:Sa). Однако такие диоды все еще обладают малой выходной мощностью (1–2 мВт). Изучена зависимость длины волны излучения таких источников от проходящего тока. Установлено, что зависимость имеет линейный характер. Проверена стабильность длины волны излучения в течение 24 часов и определена величина ее отклонения в пределах 1 %.

Продемонстрировано применение двухдлинноволновой голографической интерферометрии для измерения формы объектов, используемых в различных технических приложениях: элемента кузова автомобиля и защитного элемента внутренней стенки Токамакреактора. Рассмотрены различные конфигурации оптических схем регистрации первичных голограмм, что позволяет в зависимости от требований оптимизировать захват изображений.

Рассмотрен основной недостаток метода, связанный с зависимостью взаимной корреляции спек-структур от разности длин волн, используемых при регистрации голограмм, что ограничивает его чувствительность и применение.

Литература

- Pedrini G., Zou Y.L., Tiziani H.J. Digital double-pulsed holographic interferometry for vibration analysis // Journal of Modern Optics. 1995. V. 42. N 2. P. 367-374.https://doi. org/10.1080/09500349514550321
- Pedrini G., Zou Y.-L., Tiziani H.J. Simultaneous quantitative evaluation of in-plane and out-of-plane deformations by use of a multidirectional spatial carrier // Applied Optics. 1997. V. 36. N 4. P. 786–792. https://doi.org/10.1364/ao.36.000786
- Pedrini G., Tiziani H., Zou Y. Digital holographic interferometry // Digital Speckle Pattern Interferometry and Related Techniques / ed. by P.K. Rastogi. Chichester, N.Y.: Wiley, 2001. P. 337–362.
- Alexeenko I., Gusev M., Gurevich V. Separate recording of rationally related vibration frequencies using digital stroboscopic holographic interferometry // Applied Optics. 2009. V. 48. N 18. P. 3475–3480. https://doi.org/10.1364/ao.48.003475
- Vandenrijt J.-F., Thizy C., Martin L., Beaumont F., Garcia J., Fabron C., Prieto É., Maciaszek T., Georges M.P. Digital holographic interferometry in the long-wave infrared and temporal phase unwrapping for measuring large deformations and rigid body motions of segmented space detector in cryogenic test // Optical Engineering. 2016. V. 55. N 12. P. 121723–121723. https://doi.org/10.1117/1. oe.55.12.121723
- Dyomin V., Gribenyukov A., Davydova A., Zinoviev M., Olshukov A., Podzyvalov S., Polovtsev I., Yudin N. Holography of particles for diagnostics tasks // Applied Optics. 2019. V. 58. N 34. P. G300–G310. https://doi.org/10.1364/ao.58.00g300
- Belashov A.V., Zhikhoreva A.A., Semenova I.V. Recording of long low-amplitude bulk elastic waves in transparent solid waveguides by digital and classical holography // Applied Sciences. 2022. V. 12. N 3. P. 1687. https://doi.org/10.3390/app12031687
- Zou Y.L., Pedrini G., Tiziani H.J. Two-wavelength contouring with a pulsed ruby laser by employing TV-holography // Journal of Modern Optics. 1996. V. 43. N 3. P. 653–646. https://doi. org/10.1080/09500349608232771
- Wagner C., Osten W., Seebacher S. Direct shape measurement by digital wavefront reconstruction and multi-wavelength contouring // Optical Engineering. 2000. V. 39. N 1. P. 79–85. https://doi. org/10.1117/1.602338
- Carl D., Fratz M., Pfeifer M., Giel D.M., Höfler H. Multiwavelength digital holography with autocalibration of phase shifts and artificial wavelengths // Applied Optics. 2009. V. 48. N 34. P. H1–H8. https:// doi.org/10.1117/1.602338
- Pitts R.A., Bonnin X., Escourbiac F., Frerichs H., Gunn J.P., Hirai T., Kukushkin A.S., Kaveeva E., Miller M.A., Moulton D., Rozhansky V., Senichenkov I., Sytova E., Schmitz O., Stangeby P.C., De Temmerman G., Veselova I., Wiesen S. Physics basis for the first ITER tungsten divertor // Nuclear Materials and Energy. 2019. V. 20. P. 100696. https://doi.org/10.1016/j.nme.2019.100696
- Razdobarin A.G., Gasparyan Y.M., Bogachev D.L., Dmitriev A.M., Elets D.I., Koval A.N., Kurskiev G.S., Mukhin E.E., Bulgadaryan D.G., Krat S.A., Marenkov E.D., Alekseenko I.V. Diagnostics complex of the first wall and divertor of tokamak with reactor technologies: control of erosion and temperature and monitoring of fusion fuel build-up // Plasma Physics Reports. 2022. V. 48. N 12. P. 1389–1403. https://doi.org/10.1134/ s1063780x22700283
- 13. Schnars U., Juptner W. Digital Holography. Springer-Verlag and Heidelberg GmbH & Company K, 2005. 164 p.
- Takeda M., Ina H., Kobayashi S. Fourier-transform method of fringepattern analysis for computer-based topography and interferometry // Journal of the Optical Society of America. 1982. V. 72. N 1. P. 156– 160. https://doi.org/10.1364/josa.72.000156
- Friesem A.A., Levy U. Fringe formation in two-wavelength contour holography // Applied Optics. 1976. V. 15. N 12. P. 3009–3020. https://doi.org/10.1364/ao.15.003009
- Kreis T. Handbook of Holographic Interferometry: Optical and Digital Methods. Wiley, 2005. 554 p.
- Claus D., Alekseenko I., Grabherr M., Pedrini G., Hibst R. Snap-shot topography measurement via dual-VCSEL and dual wavelength digital holographic interferometry // Light: Advanced Manufacturing. 2021. V. 2. N 4. P. 403–414. https://doi.org/10.37188/lam.2021.029
- Pedrini G., Alekseenko I., Jagannathan G., Kempenaars M., Vayakis G., Osten W. Feasibility study of digital holography for erosion measurements under extreme environmental conditions inside

References

- Pedrini G., Zou Y.L., Tiziani H.J. Digital double-pulsed holographic interferometry for vibration analysis. *Journal of Modern Optics*, 1995, vol. 42, no. 2, pp. 367–374. https://doi. org/10.1080/09500349514550321
- Pedrini G., Zou Y.-L., Tiziani H.J. Simultaneous quantitative evaluation of in-plane and out-of-plane deformations by use of a multidirectional spatial carrier. *Applied Optics*, 1997, vol. 36, no. 4, pp. 786–792. https://doi.org/10.1364/ao.36.000786
- Pedrini G., Tiziani H., Zou Y. Digital holographic interferometry. *Digital Speckle Pattern Interferometry and Related Techniques*. Ed. by P.K. Rastogi. Chichester, N.Y., Wiley, 2001, pp. 337–362.
- Alexeenko I., Gusev M., Gurevich V. Separate recording of rationally related vibration frequencies using digital stroboscopic holographic interferometry. *Applied Optics*, 2009, vol. 48, no. 18, pp. 3475–3480. https://doi.org/10.1364/ao.48.003475
- Vandenrijt J.-F., Thizy C., Martin L., Beaumont F., Garcia J., Fabron C., Prieto É., Maciaszek T., Georges M.P. Digital holographic interferometry in the long-wave infrared and temporal phase unwrapping for measuring large deformations and rigid body motions of segmented space detector in cryogenic test. *Optical Engineering*, 2016, vol. 55, no. 12, pp. 121723–121723. https://doi.org/10.1117/1. oe.55.12.121723
- Dyomin V., Gribenyukov A., Davydova A., Zinoviev M., Olshukov A., Podzyvalov S., Polovtsev I., Yudin N. Holography of particles for diagnostics tasks. *Applied Optics*, 2019, vol. 58, no. 34, pp. G300–G310. https://doi.org/10.1364/ao.58.00g300
- Belashov A.V., Zhikhoreva A.A., Semenova I.V. Recording of long low-amplitude bulk elastic waves in transparent solid waveguides by digital and classical holography. *Applied Sciences*, 2022, vol. 12, no. 3, pp. 1687. https://doi.org/10.3390/app12031687
- Zou Y.L., Pedrini G., Tiziani H.J. Two-wavelength contouring with a pulsed ruby laser by employing TV-holography. *Journal of Modern Optics*, 1996, vol. 43, no. 3, pp. 653–646. https://doi. org/10.1080/09500349608232771
- Wagner C., Osten W., Seebacher S. Direct shape measurement by digital wavefront reconstruction and multi-wavelength contouring. *Optical Engineering*, 2000, vol. 39, no. 1, pp. 79–85. https://doi. org/10.1117/1.602338
- Carl D., Fratz M., Pfeifer M., Giel D.M., Höfler H. Multiwavelength digital holography with autocalibration of phase shifts and artificial wavelengths. *Applied Optics*, 2009, vol. 48, no. 34, pp. H1–H8. https://doi.org/10.1364/ao.48.0000h1
- Pitts R.A., Bonnin X., Escourbiac F., Frerichs H., Gunn J.P., Hirai T., Kukushkin A.S., Kaveeva E., Miller M.A., Moulton D., Rozhansky V., Senichenkov I., Sytova E., Schmitz O., Stangeby P.C., De Temmerman G., Veselova I., Wiesen S. Physics basis for the first ITER tungsten divertor. *Nuclear Materials and Energy*, 2019, vol. 20, pp. 100696. https://doi.org/10.1016/j.nme.2019.100696
- Razdobarin A.G., Gasparyan Y.M., Bogachev D.L., Dmitriev A.M., Elets D.I., Koval A.N., Kurskiev G.S., Mukhin E.E., Bulgadaryan D.G., Krat S.A., Marenkov E.D., Alekseenko I.V. Diagnostics complex of the first wall and divertor of tokamak with reactor technologies: control of erosion and temperature and monitoring of fusion fuel build-up. *Plasma Physics Reports*, 2022, vol. 48, no. 12, pp. 1389–1403. https://doi.org/10.1134/ s1063780x22700283
- 13. Schnars U., Juptner W. *Digital Holography*. Springer-Verlag and Heidelberg GmbH & Company K, 2005, 164 p.
- Takeda M., Ina H., Kobayashi S. Fourier-transform method of fringepattern analysis for computer-based topography and interferometry. *Journal of the Optical Society of America*, 1982, vol. 72. no. 1. pp. 156–160. https://doi.org/10.1364/josa.72.000156
- Friesem A.A., Levy U. Fringe formation in two-wavelength contour holography. *Applied Optics*, 1976, vol. 15, no. 12. pp. 3009–3020. https://doi.org/10.1364/ao.15.003009
- 16. Kreis T. Handbook of Holographic Interferometry: Optical and Digital Methods. Wiley, 2005, 554 p.
- Claus D., Alekseenko I., Grabherr M., Pedrini G., Hibst R. Snap-shot topography measurement via dual-VCSEL and dual wavelength digital holographic interferometry. *Light: Advanced Manufacturing*, 2021. vol. 2, no. 4, pp. 403–414. https://doi.org/10.37188/ lam.2021.029
- Pedrini G., Alekseenko I., Jagannathan G., Kempenaars M., Vayakis G., Osten W. Feasibility study of digital holography for

the International Thermonuclear Experimental Reactor tokamak // Applied Optics. 2019. V. 58. N 5. P. A147–A155. https://doi.org/10.1364/ao.58.00a147

 Goodman J.W. Wavelength and angle diversity // Speckle Phenomena in Optics: Theory and Applications. Greewood Village: Roberts and Company Publishers, 2006. P. 153–169.

Авторы

Алексеенко Игорь Вячеславович — кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, SC 57207816753, https://orcid.org/0000-0001-8463-3304, IAlekseenko@kantiana.ru

Кожевникова Анастасия Михайловна — младший научный сотрудник, Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, 236041, Российская Федерация, SC 57284792900, https://orcid.org/0000-0002-6642-5226, AKozhevnikova1@kantiana.ru

Статья поступила в редакцию 10.08.2023 Одобрена после рецензирования 20.09.2023 Принята к печати 10.11.2023 erosion measurements under extreme environmental conditions inside the International Thermonuclear Experimental Reactor tokamak. *Applied Optics*, 2019, vol. 58, no. 5, pp. A147–A155. https://doi. org/10.1364/ao.58.00a147

 Goodman J.W. Wavelength and angle diversity. Speckle Phenomena in Optics: Theory and Applications. Greewood Village, Roberts and Company Publishers, 2006, pp. 153–169.

Authors

Igor V. Alekseenko — PhD (Physics & Mathematics), Head of Laboratory, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, sc 57207816753, https://orcid.org/0000-0001-8463-3304, IAlekseenko@kantiana.ru

Anastasiia M. Kozhevnikova — Junior Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, 236041, Russian Federation, SE 57284792900, https://orcid.org/0000-0002-6642-5226, AKozhevnikoval@kantiana.ru

Received 10.08.2023 Approved after reviewing 20.09.2023 Accepted 10.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

NHOOPMAUNOHHIJIX TEXHONOFINÄ, MEXAHNKN N ONTUKN

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1114-1121

Structural analysis of ZrO₂ and TiO₂ nanoparticles Gunel Imanova^{1,2⊠}

¹ Institute of Radiation Problems, Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan, Baku, AZ1143, Azerbaijan

² UNEC Research Center for Sustainable Development and Green Economy named after Nizami Ganjavi, Baku, AZ1001, Azerbaijan

gunel imanova55@mail.ru^{\overline}, https://orcid.org/0000-0003-3275-300X

Abstract

The constituent parts of systems where radiation-catalytic processes occur usually differ in terms of mass and electron density, structural characteristics, electrophysical and chemical properties. Therefore, interaction between phases in any form has a sharp effect on the direction and parameters of the processes in individual components. In this work, X-ray diffraction patterns of nano-ZrO2 and nano-TiO2 samples were obtained before and after gamma irradiation. The crystal structures of these samples have been studied. The resulting X-ray diffraction pattern was mainly determined by the atomic plane (ϵ), the intensity of the obtained peaks, the corresponding syngony of the sample, the lattice size, density, lattice constants, and the distance between the phase groups. The X-ray diffraction data were processed using the Fullprof program. Full-profile processing of ZrO₂ X-ray diffraction data showed that the initial sample has a monoclinic structure (space group P21/c) with the following lattice parameters: a = 5.1506 Å, b = 5.2080 Å, c = 5.3293 Å. Fullprofile processing of X-ray diffraction analysis of ZrO2 after gamma irradiation showed a change in the structure from the monoclinic (space group P21/c) phase to the triclinic (space group P1). Full profile processing of TiO_2 X-ray diffraction data showed that the sample has a tetragonal structure (space group P42/mnm) with the following lattice parameters: a = b = 4.5931 Å, c = 2.9592 Å and unit cell. As a result of calculations (B_R = 1.27; R_F = 1.98; $\chi^2 = 2.68$), it was found that the structure of the initial TiO_2 sample is single-phase, tetragonal, and is described by the space group P42/mnm. Crystal structure of ZrO₂ (monoclinic structures, space group P21/c). Crystal structure of TiO₂ (tetragonal structure space group P42/mnm). The scientific component of the article is of interest because it touches upon the issues of structural transformations of zirconium oxide and titanium under the action of gamma radiation.

Keywords

nano-ZrO2, nano-TiO2, X-ray diffraction, crystal structure, gamma radiation

Acknowledgements

I express my gratitude to Farhad Khallokov, scientist of "Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan", and Ilkhom Bekpulatov, scientist of "Tashkent State Technical University", for helping me in the research conducting.

For citation: Imanova G. Structural analysis of ZrO₂ and TiO₂ nanoparticles. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1114–1121. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1114-1121

УДК 676.014.8

Структурный анализ наночастиц ZrO₂ и TiO₂

Гюнель Иманова^{1,2}

¹ Институт Радиационных Проблем, Министерство науки и образования Азербайджанской Республики, Баку, AZ1143, Азербайджан

² Исследовательский центр UNEC по устойчивому развитию и зеленой экономике имени Низами Гянджеви, Баку, AZ1001, Азербайджан

gunel imanova55@mail.ru^{\Box}, https://orcid.org/0000-0003-3275-300X

Аннотация

Введение. Составные части систем, в которых протекают радиационно-каталитические процессы, обычно различаются по массе и электронной плотности, структурным характеристикам, электрофизическим

© Imanova G., 2023

и химическим свойствам. По этой причине взаимодействие фаз в любой форме оказывает большое влияние на направление и параметры процессов в отдельных компонентах. В работе получены рентгенограммы образцов нано-ZrO₂ и нано-TiO₂ до и после гамма-облучения. Исследованы их кристаллические структуры. Метод. Характер полученной рентгенограммы определялся атомной плоскостью (є), интенсивностью полученных пиков, соответствующей сингонией образца, размером решетки, плотностью, постоянными решетки и расстоянием между фазовыми группами. Полученные данные рентгеноструктурного анализа обработаны с помощью программы Fullprof. Основные результаты. Полнопрофильная обработка данных рентгеноструктурного анализа оксида циркония (ZrO2) показала, что исходный образец имеет моноклинную структуру (пространственная группа P21/c) со следующими параметрами решетки: a = 5,1506 Å, b = 5,2080 Å,c = 5,3293 Å. Полнопрофильная обработка рентгеноструктурного анализа ZrO₂ после гамма-облучения показала изменение структуры с моноклинной (пространственная группа P21/c) фазы на триклинную (пространственная группа P1). Полнопрофильная обработка данных рентгеноструктурного анализа оксида титана (TiO₂) показала, что образец имеет тетрагональную структуру (пространственная группа P42/mnm) со следующими параметрами решетки: *a* = *b* = 4,5931 Å, *c* = 2,9592 Å и элементарной ячейкой. В результате расчетов (B_R = 1,27; R_F = 1,98; χ₂ = 2,68) установлено, что структура исходного образца TiO₂ является однофазной, тетрагональной и описывается пространственной группой Р42/mnm. Обсуждение. Таким образом, в работе показаны структурные превращения оксидов циркония и титана под действием гамма-излучения.

Ключевые слова

нано-ZrO₂, нано-TiO₂, рентгеновская дифракция, кристаллическая структура, гамма-излучение

Благодарности

Выражаю благодарность Фархад Халлокову научному сотруднику «Института ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан» и Ильхом Бекпулатову научному сотруднику «Ташкентского государственного технического университета» за помощь в проведении исследований.

Ссылка для цитирования: Иманова Г. Структурный анализ наночастиц ZrO₂ и TiO₂ // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1114–1121 (на англ. яз.). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1114-1121

Introduction

Nanometer-scale materials have recently attracted considerable scientific attention because of their beneficial high surface to volume ratio and therefore unique chemical, electronic, and physical properties. In particular titanium dioxide (TiO₂) nanoparticles are in the focus of research and thus many reports on electrical, optical, and structural properties of TiO_2 nanoparticles can be found [1–7]. Most of the research reports on the structural properties of nanoparticles dealt with the determination of structure type, physical and different microstructural parameters. X-ray diffraction line broadening studies give more useful information about the physical parameters such as crystallite size, dislocation density and strain [8-14]. TiO₂ is one of the most important materials having various important applications, such as water and air purification, self-cleaning materials and photovoltaic cells. TiO₂ is an *n*-type semiconductor having a wide band gap (3.2 eV)for anatase and 3.0 eV for rutile). Deposition of thin films of TiO₂ doped with Mn on F-doped SnO₂-coated glass by spin coating has been described. Deposition of thin films of TiO₂ on various substrates by a simple sol-gel dip coating technique has been proposed. It has various photo-catalytic applications where it can be used in two forms, i.e., as highly dispersed fine particles on porous support materials and as suspended fluids in liquid medium. Titanium (IV) oxide is a white colored compound which can be used as a coloring pigment in paints and a main ingredient of cosmetics and toothpaste. It can be prepared via reaction of titanium (IV) chloride with oxygen gas. It can also find applications in photovoltaics, photocatalysis and gas sensors. TiO_2 is a semiconductor oxide with attractive photoactivity properties under UV irradiation [15-20].

The two most studied forms of titania, rutile and anatase are photoactive [21–26]. The gap of anatase is equal to 3.23 eV whereas the gap of rutile is equal to 3.02 eV [27]. Anatase is known to be the most photoactive TiO_2 polymorphic material, but, however, it is widely used as pigments and fillers in polymer materials and coatings. Nevertheless, mixtures of both phases showed particular efficacy, for instance, the standard nano-powder P25, from Degussa, is a mixture of 80 % anatase and 20 % rutile [28–30]. This formulation limits the recombination of charges due to the lower gap of rutile, however, their photocatalytic activity depends on the compounds to be degraded; the affinity of anatase in term of adsorption of organic compounds and polymers with the particle surface is one of the most important causes of the degradation activity [31, 32]. Many reports have clarified that the photocatalytic activity of TiO2 strongly depends on its physical properties, surface area, crystallinity, and surface acidity, to name a few [33, 34]. The correlation between the photocatalytic activity and the physical properties of TiO₂ powders, such as crystal structure, surface area, crystallite size, and surface hydroxyl groups for example, has been accepted [35–37]. It is believed that the crystal structure is one of the most basic properties used to predict the photocatalytic activity; however, the main property that plays an important role is also well-known to be the surface area and the surface chemistry [38]. It has been well accepted that surface area contact is an essential factor for the effectiveness of the catalyst. Therefore, it is considered essential to have a nano-powder, in this case, which will have the smallest crystallite size in order to enhance the surface area of contact and therefore the photocatalytic activity [39-42].

Generally, the latter approach deserves a more attention in the future because it might bring new information

about the details of grain boundary evolution during the sintering ceramic materials. The energetics of formation and migration of the oxygen vacancy and interstitial in cubic zirconium dioxide (ZrO₂) are investigated by density functional theory calculations. In an O-rich environment, the negatively charged oxygen interstitial is the most dominant defect, whereas the positively charged oxygen vacancy is the most dominant defect under O-poor conditions. Oxygen interstitial migration occurs by the interstitially and the direct interstitial mechanisms, with calculated migration energy barriers of 2.94 eV and 2.15 eV, respectively. Some novel activity and crystal structure properties are observed and reported showing the anatase polymorph to exhibit high thermodynamic stability. For some nano-rutile particles photoactivity and crystal size has an unusual limitation below 25 nm where photoactivity decreases. This effect is confirmed from both methyl orange dye fading kinetics and solid-state analysis and weathering on doped isocyanate-acrylic paint films.

In the study work, XRD pattern of nano- ZrO_2 and nano- TiO_2 samples were taken before and after gamma irradiation. Crystal structures of those samples were studied.

Materials and method

As a research object, the nanoscale TiO_2 with a purity of 99.999 %, bulk density of 0.069 g/cm³, specific surface area 70-90 m²/g, and particle size to 20-30 nm (Sigma-Aldrich, Germany), the purity rate of nanoscale ZrO_2 was 99.9 % (Sky Spring Nanomaterials, USA), d = 20-30 nm, density $\rho = 0.4-0.6$ g/cm³ and special surface area $S = 330 \text{ m}^2/\text{g}$ was used in this work. X-ray diffraction studies were carried out on a Malvern Panalytical Empyrean diffractometer. XRD data were recorded using a Malvern Panalytical Empyrean analytical diffractometer with CuKa radiation ($\lambda = 1.54$ Å). In this experiment, the accelerating voltage of the radiation generator was set to 45 kV and the emission current to 40 mA. X-ray diffraction patterns were recorded in Bragg-Brentano beam geometry at $2\theta = 20^{\circ}$ - 70° continuously at a scan rate of 0.43 degrees/min. The resulting X-ray diffraction pattern was mainly determined by the lattice strain (ϵ), the intensity of the obtained peaks, the corresponding syngony of the sample, the lattice size, density, lattice constants, and the distance between the phase groups. The lattice parameters are calculated based on the square formulas of crystallography [15, 18, 29]. Irradiation of ZrO₂ and TiO₂ samples was carried out in a gamma device with ⁶⁰Co sources ($E_{av} = 1.25$ MeV) at a dose rate of 75 R/s, up to an exposure dose of 10^6 R.

Results and discussion

Nano-ZrO₂. The X-ray diffraction data were processed using the Fullprof program. The results of measurement and processing of X-ray diffraction data are shown in Fig. 1 and Table 1.

Full-profile processing of ZrO₂ X-ray diffraction data showed that the initial sample has a monoclinic structure (space group P21/c) with the following lattice parameters: a = 5.1506 Å, b = 5.2080 Å, c = 5.3293 Å and unit cell (Table 1). Here, x, y, and z represent the size of the atoms. As a result of calculations (B_R = 1.78; R_F = 1.59; $\chi_2 = 2.71$), it was found that the structure of the original ZrO₂ sample is single-phase, monoclinic, and is described by the space group P21/c (Fig. 1, Intensity is in arbitrary units, a.u.).

The unit cell of the ZrO_2 monoclinic structure is shown in Fig. 2 and Table 2.



Fig. 1. X-ray diffraction pattern of the original ZrO₂ sample: I — experimental and calculated data; II — Bragg reflections; III — difference curve between experimental and calculated data



Fig. 2. Crystal structure of ZrO₂ (monoclinic structures, space group P21/c)

Molecule		Thormal factor P		
	x/a	y/b	z/c	
Zr	0.2763	0.0421	0.2096	0.4028
0 ₁	0.0692	0.1662	0.8438	0.9572
0 ₂	0.4493	0.7425	0.9786	0.5355

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

Sample	20, °	β _s ,°	D, nm	$\delta \times 10^{15}$, lines/m ²	ε, %
Initial ZrO ₂	28.128	0.506	15.23	4.31	0.88
Gamma-irradiated ZrO ₂	28.134	0.513	15.02	4.43	0.89

Table 2. Properties of gamma-irradiated ZrO₂

Based on the obtained powder X-ray diffraction data, the size of crystallites was determined using the Scherrer formula.

$$D = \frac{k\lambda}{\beta_{\rm s} \cos\theta},$$

where *D* is the average crystallite size, *k* is the geometric coefficient (0.9), λ is the X-ray wavelength (1.5406 Å), β_s is the diffraction reflection width at half maximum (FWHM), and θ is the diffraction angle.

The dislocation density was determined from the equation:

$$\delta = 1/D^2$$
.



Fig. 3. X-ray pattern of an irradiated ZrO₂ sample: I — experimental and calculated data; II — Bragg reflections; III — difference curve between experimental and calculated data

The microstress value in ${\rm ZrO}_2$ was calculated using the Stokes-Wilson equation:

$$\varepsilon = \frac{\beta}{4\tan\theta}.$$

Full-profile processing of X-ray diffraction analysis of ZrO₂ after gamma irradiation showed a change in the structure from the monoclinic (space group P21/c) phase to the triclinic (space group P1). As a result (Fig. 3 and Fig. 4) of calculations of the irradiated ZrO₂ sample, the combination (B_R = 1.13; R_F = 2.52; χ^2 = 1.88) was found. On the other hand, the electronic properties

On the other hand, the electronic properties investigations show that the displacement of oxygen atoms for tetragonal structure leads to half of the zirconium– oxygen bonds becoming stronger and the other half weaker



Fig. 4. Crystal structure of ZrO₂ (triclinic structures, space group P1)



Fig. 5. 2D (a) and 3D (b) view of electron density maps of ZrO_2

when they are compared with the bonds in cubic zirconia. According to the band structure calculations of different zirconia phases, the cotunnite structure is supposed to be better than the other ones as gate dielectric material (Fig. 5, Density is in relative units, r.u.).

Nano-TiO₂. The X-ray diffraction data were processed using the Fullprof program. The results of measurement and processing of X-ray diffraction data are shown in Fig. 6 and in Table 3.

Full-profile processing of TiO₂ X-ray diffraction data showed that the sample has a tetragonal structure (space group P42/mnm) with the following lattice parameters: a = b = 4.5931 Å, c = 2.9592 Å and unit cell (Table 3). As a result of calculations (B_R = 1.27; R_F = 1.98; $\chi^2 = 2.68$), it was found that the structure of the initial TiO₂ sample is single-phase, tetragonal, and is described by the space group P42/mnm (Table 4). The elementary cell of the tetragonal TiO₂ structure is shown in Fig. 7.

Full-profile processing of X-ray diffraction data of TiO₂ after gamma irradiation (Fig. 8) shows that the lattice parameters increase: a = b = 4.5946 Å, c = 2.9609 Å and tetragonal showed that it has a structure (space group P42/mnm) and unit cell (Table 5) as a result of calculations of the irradiated TiO₂ sample (B_R = 1.09; R_F = 2.67; χ_2 = 1.77).

Ionizing radiation is often more energetic than nonionizing radiation and, as a result, is more likely to induce electronic transitions of atoms and molecules. In electronic excitation, an electron absorbing the radiation transits into a higher electronic state becoming less bounded to the nucleus and therefore more reactive. If the radiation has sufficient energy, the electron can escape the coulomb attraction of the nucleus, and the molecule is ionized. In





Table	3.	X-ray	diffraction	data
-------	----	-------	-------------	------

Malagula	Coo	rdinates of at	oms	Thermal
Molecule	x/a	y/b	z/c	factor B
Ti	0.00000	0.00000	0.50000	0.15676
O ₂	0.19568	0.80432	0.00000	0.16562



Fig. 7. Crystal structure of TiO₂ (tetragonal structure space group P42/mnm)

Table 4. Properties of gamma-irradiated TiO2

Impact external physical parameters	Initial	Gamma radiation ×10 ⁶ , Gy
D, nm	0.68	0.33
$\sigma \times 10^{14}$, m ⁻²	0.02	0.09

contrast, molecules undergoing rotational or vibrational transitions experience minimal changes in the stability of the electron-nucleus attraction, resulting in negligible chemical effects. Therefore, the scientific component of the article is of interest because it touches upon the issues of structural transformations of zirconium oxide and titanium under the action of gamma radiation.



Fig. 8. X-ray pattern of an irradiated TiO₂ sample: I — experimental and calculated data; II — Bragg reflections; III — difference curve between experimental and calculated data

Table 5. X-ray diffraction data of the irradiated TiO_2 sample

Malagula	Coo	Thermal		
Molecule	x/a	y/b	z/c	factor B
Ti	0.00000	0.00000	0.50000	0.36946
O ₂	0.19568	0.80432	0.00000	0.24743

Conclusion

The study full-profile processing of ZrO_2 X-ray diffraction data showed that the initial sample has a monoclinic structure (space group P21/c) with the following lattice parameters: a = 5.1506 Å, b = 5.2080 Å, c = 5.3293 Å. X-ray diffraction analysis of ZrO₂ after gamma irradiation showed a change in the structure from the monoclinic (space group P21/c) phase to the triclinic (space group P1). As a result of calculations of the irradiated ZrO₂ sample, the combination (B_R = 1.13; R_F = 2.52; $\chi^2 = 1.88$) was found. Full-profile processing of TiO₂ X-ray diffraction data showed that the sample has a tetragonal structure (space group P42/mnm) with

References

- Mustafayev I.I., Mahmudov H.M. Radiation-thermal desulphurization of organic fuels. *Journal of Radiation Researches*, 2015, vol. 2, no. 2, pp. 65–70.
- Mahmudov H.M., Suleymanov T.Y., Aliyev S.M., Huseynova S.A., Azizova K.V., Mammadova B.M. Kinetics and mechanism of formation of gaseous products obtained by radiation-catalytic conversion of n-hexane on the surface of nano-ZrO₂. *Journal of Radiation Research*, 2018, vol. 5, no. 2, pp. 119–125.
- 3. Imanova G.T. Kinetics of radiation-heterogeneous and catalytic processes of water in the presence of zirconia nanoparticles. *Advanced Physical Research*, 2020, vol. 2, no. 2, pp. 94–101.
- Imanova G.T. Gamma rays mediated hydrogen generation by water decomposition on nano-ZrO₂ surface. *Modern Approaches on Material Science*, 2021, vol. 4, no. 3, pp. 508–514. https://doi. org/10.32474/MAMS.2021.04.000186
- Jabbarova L.Y., Mustafayev I.I., Akbarov R.Y., Mirzayeva A.S. Study of post-radiation processes in model hexane/hexene binary systems. *Journal of Radiation Research*, 2022, vol. 9, no. 1, pp. 58–63.
- Musayeva Sh.Z. Impact of n-ZrO₂ on the radiolysis of hexane. Journal of Radiation Researches, 2021, vol. 8, no. 1, pp. 42–47.
- Garibov A.A. Size effects in radiation-catalytic processes of water decomposition and perspectives of use of nanocatalysts in this field. *Journal of Radiation Researches*, 2014, vol. 1, no. 1, pp. 5–13.
- Agayev T.N., Musayeva Sh.Z., Mahmudov H.M. Kinetics of accumulation of hydrocarbons and oxidation products during radiolysis of a mixture of water-hexan. *Journal of Radiation Researches*, 2018, vol. 5, no. 2, pp. 198–203.
- Gulieva U.A., Gurbanov M.A., Mahmudov H.M. Study of radiation degradation of phenol in aqueous solution by uv spectroscopy. *Journal of Radiation Researches*, 2014, vol. 1, no. 1, pp. 76–79.
- Garibov A.A., Agayev T.N., Imanova G.T. Nanostructured materials based on nano-ZrO₂ in the nuclear-power engineering. *Journal of Radiation Researches*, 2014, vol. 1, no. 1, pp. 50–56.
- Garibov A.A., Agayev T.N., Mansimov Z.A., Eyyubov K.T. Influence of temperature and density of water vapor on the yield of molecular hydrogen in the presence of radium-silicate. *Journal of Radiation Researches*, 2014, vol. 1, no. 1, pp. 57–60.
- Jafarov Y.D., Bashirova S.M., Aliyev S.M. The impact of mass and size effects on the water radiolysis process in Si + H₂O system. Journal of Radiation Researches, 2015, vol. 2, no. 2, pp. 21–26.
- Agayev T.N., Huseynov V.I., Eyubov K.T. Research of hightemperature oxidation of zirconium by the thermo gravimetric method. *Journal of Radiation Researches*, 2017, vol. 4, no. 1, pp. 37–42.
 Mahmudov H., Suleymanov T., Sabzaliyeva Z., Imanova G.,
- Mahmudov H., Suleymanov T., Sabzaliyeva Z., Imanova G., Akhundzada H.V., Azizova K., Hasanova S., Hasanov S. Kinetic interaction of hexan conversion and oxidation on the surface of an Al₂O₃ nanocatalyzer at room temperature under the effect of gamma radiation. *Journal of Chemistry*, 2021, pp. 9493765. https://doi. org/10.1155/2021/9493765
- Imanova G.T., Agayev T.N., Jabarov S.H. Investigation of structural and optical properties of zirconia dioxide nanoparticles by radiation and thermal methods. *Modern Physics Letters B*, 2021, vol. 35, no. 2, pp. 2150050. https://doi.org/10.1142/s0217984921500500

the following lattice parameters: a = b = 4.5931 Å, c = 2.9592 Å and unit cell. As a result of calculations with combination (B_R = 1.27; R_F = 1.98; $\chi^2 = 2.68$), it was found that the structure of the initial TiO₂ sample is single-phase, tetragonal, and is described by the space group P42/mnm. Full-profile processing of X-ray diffraction data of TiO₂ after gamma irradiation shows that the lattice parameters increase: a = b = 4.5946 Å, c = 2.9609 Å and tetragonal showed that it has a structure (space group P42/mnm), unit cell (Table 5) as a result of calculations of the irradiated TiO₂ sample (B_R = 1.09; R_F = 2.67; $\chi^2 = 1.77$). Crystal structure of ZrO₂ is monoclinic structure (space group P21/c). Crystal structure of TiO₂ is tetragonal structure (space group P42/mnm).

Литература

- Mustafayev I.I., Mahmudov H.M. Radiation-thermal desulphurization of organic fuels // Journal of Radiation Researches. 2015. V. 2. N 2. P. 65–70.
- Mahmudov H.M., Suleymanov T.Y., Aliyev S.M., Huseynova S.A., Azizova K.V., Mammadova B.M. Kinetics and mechanism of formation of gaseous products obtained by radiation-catalytic conversion of n-hexane on the surface of nano-ZrO₂ // Journal of Radiation Research. 2018. V. 5. N 2. P. 119–125.
- Imanova G.T. Kinetics of radiation-heterogeneous and catalytic processes of water in the presence of zirconia nanoparticles // Advanced Physical Research. 2020. V. 2. N 2. P. 94–101.
- Imanova G.T. Gamma rays mediated hydrogen generation by water decomposition on nano-ZrO₂ surface // Modern Approaches on Material Science. 2021. V. 4. N 3. P. 508–514. https://doi. org/10.32474/MAMS.2021.04.000186
- Jabbarova L.Y., Mustafayev I.I., Akbarov R.Y., Mirzayeva A.S. Study of post-radiation processes in model hexane/hexene binary systems // Journal of Radiation Research. 2022. V. 9. N 1. P. 58–63.
- Musayeva Sh.Z. Impact of n-ZrO₂ on the radiolysis of hexane // Journal of Radiation Researches. 2021. V. 8. N 1. P. 42–47.
- Garibov A.A. Size effects in radiation-catalytic processes of water decomposition and perspectives of use of nanocatalysts in this field // Journal of Radiation Researches. 2014. V. 1. N 1. P. 5–13.
- Agayev T.N., Musayeva Sh.Z., Mahmudov H.M. Kinetics of accumulation of hydrocarbons and oxidation products during radiolysis of a mixture of water-hexan // Journal of Radiation Researches. 2018. V. 5. N 2. P. 198–203.
- Gulieva U.A., Gurbanov M.A., Mahmudov H.M. Study of radiation degradation of phenol in aqueous solution by uv spectroscopy // Journal of Radiation Researches. 2014. V. 1. N 1. P. 76–79.
- Garibov A.A., Agayev T.N., Imanova G.T. Nanostructured materials based on nano-ZrO₂ in the nuclear-power engineering // Journal of Radiation Researches. 2014. V. 1. N 1. P. 50–56.
- Garibov A.A., Agayev T.N., Mansimov Z.A., Eyyubov K.T. Influence of temperature and density of water vapor on the yield of molecular hydrogen in the presence of radium-silicate // Journal of Radiation Researches. 2014. V. 1. N 1. P. 57–60.
- 12. Jafarov Y.D., Bashirova S.M., Aliyev S.M. The impact of mass and size effects on the water radiolysis process in Si + H_2O system // Journal of Radiation Researches. 2015. V. 2. N 2. P. 21–26.
- 13. Agayev T.N., Huseynov V.I., Eyubov K.T. Research of hightemperature oxidation of zirconium by the thermo gravimetric method // Journal of Radiation Researches. 2017. V. 4. N 1. P. 37–42.
- Mahmudov H., Suleymanov T., Sabzaliyeva Z., Imanova G., Akhundzada H.V., Azizova K., Hasanova S., Hasanov S. Kinetic interaction of hexan conversion and oxidation on the surface of an Al₂O₃ nanocatalyzer at room temperature under the effect of gamma radiation // Journal of Chemistry. 2021. P. 9493765. https://doi. org/10.1155/2021/9493765
- Imanova G.T., Agayev T.N., Jabarov S.H. Investigation of structural and optical properties of zirconia dioxide nanoparticles by radiation and thermal methods // Modern Physics Letters B. 2021. V. 35. N 2. P. 2150050. https://doi.org/10.1142/s0217984921500500

- Ali I., Imanova G.T., Garibov A.A., Agayev T.N., Jabarov S.H., Almalki A.SA., Alsubaie A. Gamma rays mediated water splitting on nano-ZrO₂ surface: Kinetics of molecular hydrogen formation. *Radiation Physics and Chemistry*, 2021, vol. 183, pp. 109431. https:// doi.org/10.1016/j.radphyschem.2021.109431
- Agayev T.N., Musayeva Sh.Z., Imanova G.T. Kinetics of formation of molecular hydrogen during the radiolysis of hexane and a mixture of C₆H₁₄–H₂O on a surface of ZrO₂ Nanoparticles. *Russian Journal* of *Physical Chemistry A*, 2021, vol. 95, no. 2, pp. 270–272. https:// doi.org/10.1134/s0036024421020023
- Imanova G.T., Agaev T.N., Garibov A.A., Melikova S.Z., Jabarov S.H., Akhundzada H.V. Radiation-thermocatalytic and thermocatalytic properties of n-ZrO₂-n-SiO₂ systems in the process of obtaining hydrogen from water at different temperatures. *Journal* of *Molecular Structure*, 2021, vol. 1241, pp. 130651. https://doi. org/10.1016/j.molstruc.2021.130651
- Ali I., Imanova G.T., Mbianda X.Y., Alharbi O.M.L. Role of the radiations in water splitting for hydrogen generation. *Sustainable Energy Technologies and Assessments*, 2022, vol. 51, pp. 101926. https://doi.org/10.1016/j.seta.2021.101926
- Ali I., Imanova G.T., Albishri H.M., Alshitari W.H., Locatelli M., Siddiqui M.N., Hameed A.M. An ionic-liquid-imprinted nanocomposite adsorbent: Simulation, kinetics and thermodynamic studies of triclosan endocrine disturbing water contaminant removal. *Molecules*, 2022, vol. 27, no. 17, pp. 5358. https://doi.org/10.3390/ molecules27175358
- Tursunmetova Z.A., Imanova G., Bekpulatov I. Method for lowtemperature vacuum-thermal cleaning of surface single crystals Si and GaAs. *Journal of Polytechnic*, 2022, vol. 25, no. 2, pp. 921–927. https://doi.org/10.2339/politeknik.1119884
- 22. Ali I., Imanova G., Agayev T., Aliyev A., Alharbi O.M.L., Alsubaie A., Almalki A.S.A. A comparison of hydrogen production by water splitting on the surface of α-, δ- and γ-Al₂O₃. *ChemistrySelect*, 2022, vol. 7, no. 34, pp. e202202618. https://doi. org/10.1002/slct.202202618
- Ali I., Imanova G., Agayev T., Aliyev A., Jabarov S., Albishri H.M., Alshitari W.H., Hameed A.M., Alharbi A. Seawater splitting for hydrogen generation using zirconium and its niobium alloy under gamma radiation. *Molecules*, 2022, vol. 27, no. 19, pp. 6325. https:// doi.org/10.3390/molecules27196325
- Imran A., Imanova G. Sorbtion: A universal technology for water purification. Advanced Physical Research, 2022, vol. 4, no. 1, pp. 5–9.
- Agayev T., Imanova G., Aliyev A. Influence of gamma radiation on current density and volt–ampere characteristics of metallic zirconium. *International Journal of Modern Physics B*, 2022, vol. 36, no. 19, pp. 2250115. https://doi.org/10.1142/s0217979222501156
- 26. Ali I., Mahmudov H., Imanova G., Suleymanov T., Hameed A.M., Alharbi A. Hydrogen production on nano Al₂O₃ surface by water splitting using gamma radiation. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 2023, vol. 98. no. 2, pp. 1186–1191. https://doi. org/10.1002/jctb.7322
- Barkaoui S., Haddaoui M., Dhaouadi H., Raouafi N., Touati F. Hydrothermal synthesis of urchin-like Co₃O₄ nanostructures and their electrochemical sensing performance of H₂O₂. *Journal of Solid State Chemistry*, 2015, vol. 228, pp. 226–231. https://doi.org/10.1016/j. jssc.2015.04.043
- Barkaoui S., Dhaouadi H., Kouass S., Touati F. Structural and optical proprieties of doped cobalt oxide: CuxCo₃-xO₄ (x = 0.0; 0.1; 0.2; 0.4; and 0.6). *Optik*, 2015, vol. 126, no. 9-10, pp. 1047–1051. https://doi. org/10.1016/j.ijleo.2015.02.056
- Imanova G., Asgerov E., Jabarov S., Mansimov Z., Kaya M., Doroshkevich A. Hydrogen generation during thermal processes of water decomposition on the surface of nano-ZrO₂ + 3mol.%Y₂O₃. *Trends in Sciences*, 2023, vol. 20, no. 4, pp. 4684. https://doi. org/10.48048/tis.2023.4684
- Ali I., Agayev T., Imanova G., Mahmudov H., Musayeva Sh., Alharbi O.M.L., Siddiqui M.N. Effective hydrogen generation using water-n-hexane-ZrO₂ system: Effect of temperature and radiation irradiation time. *Materials Letters*, 2023, vol. 340, pp. 134188. https:// doi.org/10.1016/j.matlet.2023.134188
- Bekpulatov I.R., Imanova G.T., Kamilov T.S., Igamov B.D., Turapov I.Kh. Formation of n-type CoSi monosilicide film which can be used in instrumentation. *International Journal of Modern Physics B*, 2023, vol. 37, no. 17, pp. 22350164. https://doi.org/10.1142/ s0217979223501643

- Ali I., Imanova G.T., Garibov A.A., Agayev T.N., Jabarov S.H., Almalki A.SA., Alsubaie A. Gamma rays mediated water splitting on nano-ZrO₂ surface: Kinetics of molecular hydrogen formation // Radiation Physics and Chemistry. 2021. V. 183. P. 109431. https:// doi.org/10.1016/j.radphyschem.2021.109431
- 17. Agayev T.N., Musayeva Sh.Z., Imanova G.T. Kinetics of formation of molecular hydrogen during the radiolysis of hexane and a mixture of C_6H_{14} -H₂O on a surface of ZrO₂ Nanoparticles // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2021 V. 95. N 2. P. 270–272. https://doi.org/10.1134/s0036024421020023
- Imanova G.T., Agaev T.N., Garibov A.A., Melikova S.Z., Jabarov S.H., Akhundzada H.V. Radiation-thermocatalytic and thermocatalytic properties of n-ZrO₂-n-SiO₂ systems in the process of obtaining hydrogen from water at different temperatures // Journal of Molecular Structure. 2021. V. 1241. P. 130651. https://doi. org/10.1016/j.molstruc.2021.130651
- Ali I., Imanova G.T., Mbianda X.Y., Alharbi O.M.L. Role of the radiations in water splitting for hydrogen generation // Sustainable Energy Technologies and Assessments. 2022. V. 51. P. 101926. https:// doi.org/10.1016/j.seta.2021.101926
- Ali I., Imanova G.T., Albishri H.M., Alshitari W.H., Locatelli M., Siddiqui M.N., Hameed A.M. An ionic-liquid-imprinted nanocomposite adsorbent: Simulation, kinetics and thermodynamic studies of triclosan endocrine disturbing water contaminant removal // Molecules. 2022. V. 27. N 17. P. 5358. https://doi.org/10.3390/ molecules27175358
- Tursunmetova Z.A., Imanova G., Bekpulatov I. Method for lowtemperature vacuum-thermal cleaning of surface single crystals Si and GaAs // Journal of Polytechnic. 2022. V. 25. N 2. P. 921–927. https://doi.org/10.2339/politeknik.1119884
- 22. Ali I., Imanova G., Agayev T., Aliyev A., Alharbi O.M.L., Alsubaie A., Almalki A.S.A. A comparison of hydrogen production by water splitting on the surface of α-, δ- and γ-Al₂O₃ // ChemistrySelect. 2022. V. 7. N 34. P. e202202618. https://doi. org/10.1002/slct.202202618
- Ali I., Imanova G., Agayev T., Aliyev A., Jabarov S., Albishri H.M., Alshitari W.H., Hameed A.M., Alharbi A. Seawater splitting for hydrogen generation using zirconium and its niobium alloy under gamma radiation // Molecules. 2022. V. 27. N 19. P. 6325. https://doi. org/10.3390/molecules27196325
- Imran A., Imanova G. Sorbtion: A universal technology for water purfication // Advanced Physical Research. 2022. V. 4. N 1. P. 5–9.
- Agayev T., Imanova G., Aliyev A. Influence of gamma radiation on current density and volt–ampere characteristics of metallic zirconium // International Journal of Modern Physics B. 2022. V. 36. N 19. P. 2250115. https://doi.org/10.1142/s0217979222501156
- Ali I., Mahmudov H., Imanova G., Suleymanov T., Hameed A.M., Alharbi A. Hydrogen production on nano Al₂O₃ surface by water splitting using gamma radiation // Journal of Chemical Technology & Biotechnology. 2023. V. 98. N 2. P. 1186–1191. https://doi. org/10.1002/jctb.7322
- Barkaoui S., Haddaoui M., Dhaouadi H., Raouafi N., Touati F. Hydrothermal synthesis of urchin-like Co₃O₄ nanostructures and their electrochemical sensing performance of H₂O₂ // Journal of Solid State Chemistry. 2015. V. 228. P. 226–231. https://doi.org/10.1016/j. jssc.2015.04.043
- Barkaoui S., Dhaouadi H., Kouass S., Touati F. Structural and optical proprieties of doped cobalt oxide: CuxCo₃-xO₄ (x = 0.0; 0.1; 0.2; 0.4; and 0.6) // Optik. 2015. V. 126. N 9-10. P. 1047–1051. https://doi. org/10.1016/j.ijleo.2015.02.056
- Imanova G., Asgerov E., Jabarov S., Mansimov Z., Kaya M., Doroshkevich A. Hydrogen generation during thermal processes of water decomposition on the surface of nano-ZrO₂ + 3mol.%Y₂O₃ // Trends in Sciences. 2023. V. 20. N 4. P. 4684. https://doi. org/10.48048/tis.2023.4684
- Ali I., Agayev T., Imanova G., Mahmudov H., Musayeva Sh., Alharbi O.M.L., Siddiqui M.N. Effective hydrogen generation using water-n-hexane-ZrO₂ system: Effect of temperature and radiation irradiation time // Materials Letters. 2023. V. 340. P. 134188. https:// doi.org/10.1016/j.matlet.2023.134188
- Bekpulatov I.R., Imanova G.T., Kamilov T.S., Igamov B.D., Turapov I.Kh. Formation of n-type CoSi monosilicide film which can be used in instrumentation // International Journal of Modern Physics B. 2023. V. 37. N 17. P. 22350164. https://doi.org/10.1142/ s0217979223501643

- 32. Umirzakov B.E., Imanova G.T., Bekpulatov I.R., Turapov I.Kh. Obtaining of thin films of manganese silicides on a Si surface by the method of solid-phase deposition and investigation of their electronic structure. *Modern Physics Letters B*, 2023, vol. 37, no. 24, pp. 2350078. https://doi.org/10.1142/S0217984923500781
- 33. Mansimov Z., Imanova G., Garibov A., Agayev T. investigation of radiation-heterogeneous and catalytic processes in the surface of (RaO)x(SiO₂)y + H₂O system. *Journal of the Turkish Chemical Society Section A: Chemistry*, 2023, vol. 10, no. 2, pp. 487–492. https://doi.org/10.18596/jotcsa.1118855
- Barkaoui S., Chakhari S., Kouass S., Dhaouadi H., Imanova G., Touati F. Influence of Ag-doping-cobalt oxide on the structure, optical properties, morphology and preferential oxidation activity of CO. *Advanced Physical Research*, 2022, vol. 4, no. 1, pp. 22–32.
- 35. Canpolat G., Ziyadanoğullari R. Recovery of copper from complex copper oxide ore by flotation and leaching methods. *Advanced Physical Research*, 2023, vol. 5, no. 2, pp. 103–116.
- 36. Teng F., Chen M., Li G., Teng Y., Xu T., Hang Y., Yao W., Santhanagopalan S., Meng D.D., Zhu Y. High combustion activity of CH₄ and catalluminescence properties of CO oxidation over porous Co₃O₄ nanorods. *Applied Catalysis B: Environmental*, 2011, vol. 110, pp. 133–140. https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2011.08.035
- Che H., Liu A., Fu Q., Jiang R. Facile synthesis of porous cobalt oxide microdises and their catalytic property in CO oxidation. *Materials Letters*, 2013, vol. 93, pp. 240–243. https://doi.org/10.1016/j. matlet.2012.11.108
- Barkaoui S., Imanova G. Hydrothermal synthesis of Co₃O₄ urchinlike and their catalytic properties in CO oxidation. *Juniper Online Journal Material Science*, 2022, vol. 7, no. 1, pp. 555704. https://doi. org/10.19080/jojms.2022.07.555704
- 39. Popov E.P., Aliyev O.A., Demir E., Neov D., Doroshkevich A.S., Mirzayev M.N., Horodek P., Thabethe T.T., Imanova G.T., Akhundzada H.V., Sidorin A.A., Mamedov F. Kinetics of thermo heterogeneous process under non-isothermal terms on the titanium carbide: a study on the different irradiation conditions. *Advanced Physical Research*, 2022, vol. 4, no. 2, pp. 81–86.
- Aliyev Y.I., Dashdemirov A.O., Novruzov R.F. Structural phase transitions in the compound Ag_{1.55}Cu_{0.45}S at high temperatures. *Advanced Physical Research*, 2021, vol. 3, no. 3, pp. 147–152.
- Aliyeva N.A., Aliyev Y.I., Abiyev A.S. Study of thermal properties of Cu₄Se_{1.5}Te_{0.5} and Cu₄Te_{1.5}Se_{0.5} compounds by differential thermal analysis. *Advanced Physical Research*, 2022, vol. 4, no. 2, pp. 94–99.
- Normuradov M.T., Bekpulatov I.R., Imanova G.T., Igamov B.D. Structures for constructing devices from formed Mn₄Si₇ and CoSi films. *Advanced Physical Research*, 2022, vol. 4, no. 3, pp. 142–154.

Author

Gunel Imanova — PhD (Physics), Associate Professor, Leading Researcher, Institute of Radiation Problems, Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan, Baku, AZ1143, Azerbaijan; Scientific Researcher, UNEC Research Center for Sustainable Development and Green Economy named after Nizami Ganjavi, Baku, AZ1001, Azerbaijan, SC 56272342000, https://orcid.org/0000-0003-3275-300X, gunel_ imanova55@mail.ru

Received 28.07.2023 Approved after reviewing 27.08.2023 Accepted 10.11.2023

- 32. Umirzakov B.E., Imanova G.T., Bekpulatov I.R., Turapov I.Kh. Obtaining of thin films of manganese silicides on a Si surface by the method of solid-phase deposition and investigation of their electronic structure // Modern Physics Letters B. 2023. V. 37. N 24. P. 2350078. https://doi.org/10.1142/S0217984923500781
- Mansimov Z., Imanova G., Garibov A., Agayev T. Investigation of radiation-heterogeneous and catalytic processes in the surface of (RaO)x(SiO₂)y + H₂O system // Journal of the Turkish Chemical Society Section A: Chemistry. 2023. V. 10. N 2. P. 487–492. https:// doi.org/10.18596/jotcsa.1118855
- Barkaoui S., Chakhari S., Kouass S., Dhaouadi H., Imanova G., Touati F. Influence of Ag-doping-cobalt oxide on the structure, optical properties, morphology and preferential oxidation activity of CO // Advanced Physical Research. 2022. V. 4. N 1. P. 22–32.
- 35. Canpolat G., Ziyadanoğullari R. Recovery of copper from complex copper oxide ore by flotation and leaching methods // Advanced Physical Research. 2023. V. 5. N 2. P. 103–116.
- 36. Teng F., Chen M., Li G., Teng Y., Xu T., Hang Y., Yao W., Santhanagopalan S., Meng D.D., Zhu Y. High combustion activity of CH₄ and catalluminescence properties of CO oxidation over porous Co₃O₄ nanorods // Applied Catalysis B: Environmental. 2011. V. 110. P. 133–140. https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2011.08.035
- Che H., Liu A., Fu Q., Jiang R. Facile synthesis of porous cobalt oxide microdiscs and their catalytic property in CO oxidation // Materials Letters. 2013. V. 93. P. 240–243. https://doi.org/10.1016/j. matlet.2012.11.108
- Barkaoui S., Imanova G. Hydrothermal synthesis of Co3O4 urchinlike and their catalytic properties in CO oxidation // Juniper Online Journal Material Science. 2022. V. 7. N 1. P. 555704. https://doi. org/10.19080/jojms.2022.07.555704
- 39. Popov E.P., Aliyev O.A., Demir E., Neov D., Doroshkevich A.S., Mirzayev M.N., Horodek P., Thabethe T.T., Imanova G.T., Akhundzada H.V., Sidorin A.A., Mamedov F. Kinetics of thermo heterogeneous process under non-isothermal terms on the titanium carbide: a study on the different irradiation conditions // Advanced Physical Research. 2022. V. 4. N 2. P. 81–86.
- Aliyev Y.I., Dashdemirov A.O., Novruzov R.F. Structural phase transitions in the compound Ag_{1.55}Cu_{0.45}S at high temperatures // Advanced Physical Research. 2021. V. 3. N 3. P. 147–152.
- Aliyeva N.A., Aliyev Y.I., Abiyev A.S. Study of thermal properties of Cu₄Se_{1.5}Te_{0.5} and Cu₄Te_{1.5}Se_{0.5} compounds by differential thermal analysis // Advanced Physical Research. 2022. V. 4. N 2. P. 94–99.
- Normuradov M.T., Bekpulatov I.R., Imanova G.T., Igamov B.D. Structures for constructing devices from formed Mn₄Si₇ and CoSi films // Advanced Physical Research. 2022. V. 4. N 3. P. 142–154.

Автор

Иманова Гюнель — PhD (физические науки), доцент, ведущий научный сотрудник, Институт Радиационных Проблем, Министерство науки и образования Азербайджанской Республики, Баку, AZ1143, Азербайджан; научный исследователь, Исследовательский центр UNEC по устойчивому развитию и зеленой экономике имени Низами Гянджеви, Баку, AZ1001, Азербайджан, sc 56272342000, https://orcid. org/0000-0003-3275-300X, gunel_imanova55@mail.ru

Статья поступила в редакцию 28.07.2023 Одобрена после рецензирования 27.08.2023 Принята к печати 10.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November–December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

NHOOPMAUNOHHIJIX TEXHONOFINÄ, MEXAHNKN N ONTUKN

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1122-1127 УДК 539.216.2

Влияние покрытий поливинилбутираля с углеродными квантовыми точками на характеристики кремниевых солнечных элементов Владимир Николаевич Корчагин^{1⊠}, Игорь Александрович Сысоев², Виктор Иванович Ратушный³, Даниил Вячеславович Митрофанов⁴, Олег Михайлович Чапура⁵

1.2.4.5 Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355017, Российская Федерация

¹ Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. Платова, Ростовская область, Новочеркасск, 346428, Российская Федерация

³ Волгодонский инженерно-технический институт — филиал Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», Волгодонск, 347360, Российская Федерация

¹ vodnomlice@gmail.com[∞]. https://orcid.org/0000-0002-8262-4364

 1 voluminice@gmail.com \approx , https://orcid.org/0000-0002-8262-43

² eianpisia@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-5415-0782 ³ viratush@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-5701-6279

⁴ danik-20@yandex.ru, https://orcid.org/0009-0009-2137-4312

⁴ danik-20(*w*)yandex.ru, nups://orcid.org/0009-0009-2157-4512

⁵ ochapura@ncfu.ru, https://orcid.org/0000-0002-6691-0010

Аннотация

Введение. Представлены результаты исследования кремниевых солнечных элементов с функциональными покрытиями на основе поливинилбутираля с углеродными квантовыми точками. Показано изменение параметров солнечных элементов при использовании таких покрытий на фронтальной поверхности солнечных элементов. Метод. Разработан метод нанесения тонких пленок поливинилбутираля с углеродными квантовыми точками. Пленки образованы при откачке раствора изопропилового спирта с поливинилбутиралем и углеродными квантовыми точками из стеклянной кюветы при помощи перистальтического насоса таким образом, чтобы граница контакта раствора с поверхностью солнечного элемента перемещалась сверху вниз. Процесс может производиться как с воздействием ультразвука, так и без него. Спектры люминесценции углеродных квантовых точек получены с использованием монохроматора СФЛ МДР-41. Толщина покрытия измерена с помощью спектроскопического эллипсометра SE 800. Основные параметры солнечных элементов определены до и после нанесения функциональных покрытий с использованием имитатора солнечного света SolarLab 20-UST. Основные результаты. Исследования показали сильную флуоресценцию углеродных квантовых точек в ультрафиолетовой области солнечного спектра (350-450 нм). При нанесении функциональных покрытий без воздействия ультразвука наблюдалось увеличение эффективности при концентрации углеродных квантовых точек в растворе равной 119 млн⁻¹. При воздействии ультразвука получен плавный рост эффективности солнечных элементов до 2,34 % при максимальной концентрации квантовых точек в растворе 463 млн⁻¹. В коротковолновой области солнечного спектра (365-470 нм) отмечено увеличение эффективности для всех концентраций углеродных квантовых точек, который изменялся в диапазоне от 4,5 до 38 %. Обсуждение. Функциональные покрытия на основе поливинилбутираля с углеродными квантовыми точками являются перспективными и не имеющими аналогов покрытиями для солнечных элементов, которые выполняют также и дополнительную функцию в качестве защитного покрытия от ультрафиолетового излучения. Это покрытие может быть использовано при проектировании и изготовлении широкого класса оптоэлектронных приборов.

Ключевые слова

поливинилбутираль, солнечные элементы, углеродные квантовые точки, вольтамперные характеристики, коэффициент полезного действия, эффективность

Благодарности

Работа выполнена с использованием ресурсов центра коллективного пользования Северо-Кавказского федерального университета и при финансовой поддержке Минобрнауки России, уникальный идентификатор проекта RF-2296.61321X0029 (соглашение № 075-15-2021-687) (получение экспериментальных образцов пленок).

© Корчагин В.Н., Сысоев И.А., Ратушный В.И., Митрофанов Д.В., Чапура О.М., 2023

Авторы выражают благодарность Северо-Кавказскому федеральному университету за помощь в рамках конкурса поддержки проектов научных групп и отдельных ученых.

Ссылка для цитирования: Корчагин В.Н., Сысоев И.А., Ратушный В.И., Митрофанов Д.В., Чапура О.М. Влияние покрытий поливинилбутираля с углеродными квантовыми точками на характеристики кремниевых солнечных элементов // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1122–1127. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1122-1127

Investigation of polyvinyl butyral coatings with carbon quantum dots on the characteristics of silicon solar cells

Vladimir N. Korchagin^{1⊠}, Igor A. Sysoev², Victor I. Ratushny³, Daniil V. Mitrofanov⁴, Oleg M. Chapura⁵

1,2,4,5 North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355017, Russian Federation

¹ Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI), Rostov region, Novocherkassk, 346428, Russian Federation

³ Volgodonsk Engineering and Technology Institute National Research Nuclear University MEPhI, Rostov region, Volgodonsk, 347360, Russian Federation

¹ vodnomlice@gmail.com[⊠], https://orcid.org/0000-0002-8262-4364

² eianpisia@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-5415-0782

³ viratush@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-5701-6279

⁴ danik-20@yandex.ru, https://orcid.org/0009-0009-2137-4312

⁵ ochapura@ncfu.ru, https://orcid.org/0000-0002-6691-0010

Abstract

Silicon solar cells with functional coatings based on polyvinyl butyral with carbon quantum dots. The change in the parameters of solar cells, when these coatings are used on the front surface of solar cells, is studied. A know-how method has been developed, which consists in the formation of a thin film of polyvinyl butyral with carbon quantum dots on the surface of solar cells. The coating is formed when the solution (isopropyl alcohol with polyvinyl butyral and carbon quantum dots) is pumped out of the cuvette in such a way that the contact boundary of the solution with the surface of the solar cell moves from top to bottom, while the process is carried out without and with ultrasound. Using an SFL MDR-41 monochromator, the luminescence spectra of carbon quantum dots were obtained showing their strong fluorescence in the short-wavelength visible light region (350-450 nm). The coating thickness was measured by ellipsometry on a SE 800 instrument. Also, on the SolarLab 20-UST sunlight simulator, the main parameters of solar cells were measured before and after applying functional coatings. When applying functional coatings, the following pattern is observed: without exposure to ultrasound, an increase in efficiency is observed only at a concentration of carbon quantum dots in a solution equal to 119 ppm, and when exposed to ultrasound, a smooth increase in the efficiency of solar cells up to 2.34 % occurs at a maximum concentration of quantum dots of 463 ppm. In the short-wavelength region of light (365–470 nm), an increase in efficiency is observed for all concentrations of carbon quantum dots, which varies from 4.5 to 38 %. It is shown that functional coatings based on polyvinyl butyral with carbon quantum dots are promising and unparalleled coatings for solar cells, which also perform the additional function of a protective coating against ultraviolet radiation. This coating can also be used for other optoelectronic devices.

Keywords

polyvinyl butyral, solar cells, carbon quantum dots, current-voltage characteristics, efficiency.

Acknowledgments

The work was carried out using the resources of the Center for Collective Use of the North Caucasus Federal University and with financial support of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation, unique identifier of the project RF-2296.61321X0029 (agreement No. 075-15-2021-687) (obtaining experimental film samples). The authors express their gratitude to NCFU for their help in the framework of the competition to support projects of scientific groups and individual scientists of the North Caucasus Federal University.

For citation: Korchagin V.N., Sysoev I.A., Ratushny V.I., Mitrofanov D.V., Chapura O.M. Investigation of polyvinyl butyral coatings with carbon quantum dots on the characteristics of silicon solar cells. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1122–1127. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1122-1127

Введение

Развитие и исследования в области солнечной энергетики – тренд в мировой энергосистеме [1–3], поскольку экологическая ситуация в мире ухудшается и традиционные энергоресурсы истощаются. По данным международного энергетического агентства в 2027 году солнечная энергетика выйдет на первое место по объему выработки электроэнергии [4]. Основным типом солнечных элементов (СЭ) являются кремниевые, так как процесс его получения давно известен для приборов электроники и запасов из полупроводников¹.

Углеродные квантовые точки (УКТ), впервые полученные при очистке одностенных углеродных нанотрубок в 2004 г. [5–11], вызвали широкий интерес среди ученых в разных областях науки, например,

¹ Pappas S. Facts about Silicon. 2014 [Электронный ресурс]. http://www.livescience.com/28893-silicon.html (дата обращения: 25.04.2023).

биомаркеры в медицине, газовые сенсоры в физике и биохимии, QLED-дисплеи, лазеры в оптронике, а также сенсибилизированные красителем СЭ в фотовольтаике [12]. В настоящее время, по мнению авторов, большой интерес представляют УКТ в области фотовольтаики в качестве частиц, преобразующих разрушающий ультрафиолетовое излучение в более релевантный диапазон света и увеличивающие таким образом коэффициент полезного действия (КПД) СЭ.

Одно из главных оптических свойств УКТ — поглощение электромагнитных волн в диапазоне 200–400 нм и люминесценция в более длинноволновом диапазоне 365–700 нм в зависимости от размера УКТ [13–15]. Таким образом, можно сказать, что для кремния с шириной запрещенной зоны 1,12 эВ ультрафиолетовое излучение, поглощаемое УКТ, будет люминесцировать в более эффективной для кремниевого СЭ области спектра, что позволит увеличить срок службы СЭ, блокируя вредоносные ультрафиолетовые лучи.

В работе [12] УКТ применяют в виде замены сенсибилизатора в СЭ третьего поколения, так называемых ячейках Гретцеля.

В настоящей работе использованы УКТ, как функциональные покрытия на основе поливинилбутираля (ПВБ) на фронтальной поверхности кремниевого СЭ. В качестве опытных образцов выбраны поликристаллические кремниевые СЭ. Исследованы изменения параметров вольтамперных характеристик (BAX) поликристаллических кремниевых СЭ на установке SolarLab 20-UST в зависимости от режимов нанесения пленок (с ультразвуком и без) и концентрации УКТ в тонких пленках.

Материалы и методы

Для исследования выбрано восемь образцов кремниевых поликристаллических СЭ (производство SunPower, Китай). Поверхность изделий была очищена и обезжирена в изопропиловом спирте (х.ч.) и деионизованной воде. Для нанесения функционального покрытия выбран исходный раствор ПВБ марки ЛА в изопропиловом спирте с концентрацией 5 г на 100 мл. Путем перемешивания исходного раствора с УКТ приготовлены четыре раствора с концентрацией УКТ: 44, 119, 237 и 463 млн⁻¹. УКТ предоставлены фирмой ООО «Финтека» (Москва).

Нанесение пленок с УКТ осуществлено методом перекачивания раствора из буферной емкости в стеклянную кювету с образцом в чистых условиях (hepaфильтр h13). Схема установки показана на рис. 1.

Процесс нанесения осуществлен следующим образом, в кювете для нанесения покрытия 2 на специальном подвесе помещался образец СЭ 4. При помощи перистальтического насоса Kamoer KCM-ODM с шаговым двигателем-установкой типа ODMA 1 кювета из буферной емкости 3 наполнялась раствором с требуемой концентрацией УКТ. После полного погружения СЭ в раствор направление перекачивания раствора изменялось и происходило с заданной скоростью. Сушка образца СЭ с нанесенным покрытием выполнена в специальном чистом боксе в течение 5 мин. Для уль-



Рис. 1. Схема установки для нанесения функциональных покрытий: 1 — перистальтический насос; 2 — кювета для нанесения; 3 — буферная емкость; 4 — образец солнечного элемента

Fig. 1. Scheme of the installation for applying functional coatings, where: *I* — a peristaltic pump; *2* — a cuvette for application; *3* — a buffer tank; *4* — a solar cell sample

тразвукового воздействия в процессе нанесения функционального покрытия кювета 2 и буферная емкость 3 помещались в ванну AOYUE Ultrasonic Cleaner 9060. Частота ультразвуковых колебаний 40 кГц. При необходимости проводилось повторное нанесение.

Скорость прокачки раствора регулировалась шаговым двигателем при комнатной температуре. Толщина пленки измерена с помощью спектроскопического эллипсометра SE 800 (Sentech Instruments Gmbh, Германия) и при температуре (25 ± 2 °C) составила 80 ±1 нм при скорости двигателя насоса равной 35 шагов в минуту, что соответствует изменению уровня жидкого раствора равному скорости 1,95 мм/мин. Покрытия были нанесены как без ультразвукового воздействия (Образцы № 1–4), так и с воздействием ультразвука (Образцы № 5–8). Концентрация УКТ определена при помощи ЕС/РРМ метра HM Digital EC-3.

ВАХ образцов получены на установке SolarLab 20-UST, которая имеет опцию измерения параметров ВАХ при различной фиксированной длине волны света (365, 400, 460, 540, 570, 640, 750 нм) с помощью соответствующих встроенных светодиодов.

Результаты и обсуждение

Исходные значения выходных параметров образцов СЭ до нанесения покрытия (ток короткого замыкания $I_{\rm K3}$, напряжение холостого хода $V_{\rm XX}$, КПД, фактор заполнения (FF)) представлены в табл. 1.

Результаты измерений основных параметров после нанесения функциональных покрытий ПВБ с УКТ приведены в табл. 2.

В табл. 3 представлены значения относительных изменений тока короткого замыкания $\Delta I_{\rm K3}$, напряжения холостого хода $\Delta V_{\rm xx}$, коэффициента полезного действия Δ КПД и фактора заполнения Δ FF от концентрации углеродных квантовых точек УКТ.

Параметры ВАХ	Номер образца										
	1	2	3	4	5	6	7	8			
<i>I</i> _{к3} , мА/см ²	16,72	17,05	16,39	16,72	16,94	16,95	16,94	16,61			
V _{xx} , B	0,524	0,492	0,524	0,528	0,516	0,520	0,528	0,524			
КПД, %	17,37	14,61	17,04	16,20	15,33	17,85	17,94	17,97			
FF	72,82	63,90	72,67	67,18	64,37	74,27	73,70	75,40			

Таблица 1. Параметры ВАХ исходных солнечных элементов. Предельные отклонения параметров ВАХ ±0,05 *Table 1*. I–V characteristics of initial solar cells

Таблица 2. Параметры ВАХ солнечных элементов после нанесения функциональных покрытий. Предельные отклонения параметров ВАХ ±0,05

Table 2 Parameters of the I-	-V characteristics	of the solar cells aft	ter deposition o	f functional coatings
<i>Tuble 2.</i> I didilicters of the I	v onunuotoristios	or the solur cons are	to deposition o	i functional coutings

Параметры ВАХ	Номер образца										
	1	2	3	4	5	6	7	8			
<i>I</i> _{к3} , мА/см ²	17,05	17,39	16,71	17,05	17,14	17,28	17,12	17,09			
V _{xx} , B	0,522	0,512	0,519	0,522	0,511	0,525	0,532	0,529			
КПД, %	15,98	15,78	15,34	14,99	14,41	17,49	18,29	18,33			
FF	65,54	65,44	63,58	61,13	60,37	71,30	73,01	74,79			

Относительные изменения рассчитаны как отношение разности результатов после и до нанесения покрытия, разделенных на значения результатов после нанесения покрытия.

Согласно табл. 3 (нанесение происходило без ультразвука) видно, что изменение тока короткого замыкания $\Delta I_{\rm k3}$ для всех концентраций УКТ дает устойчивое увеличение в среднем на 2 %. Напряжение холостого хода $\Delta V_{\rm xx}$ с изменением концентрации УКТ от 44 до 119 млн⁻¹ сначала увеличивается на 4,11 %, а затем, при увеличении концентрации УКТ до 463 млн⁻¹, уменьшается на 0,76 %. Такое же поведение наблюдается и для КПД — сначала увеличение на 8 %, а затем уменьшение на 7–11 %. Это объясняется поглощением УКТ ультрафиолетового света (200–400 нм) и его переизлучением в ближнюю область видимого света (365–700 нм).

Известно, что со временем (после синтеза в течение суток) происходит коагуляция УКТ в растворе, поэтому желательно использовать ультразвуковую ванну при получении пленок ПВБ с УКТ. Воздействие ультразвука способствует разрушению конгломератов на отдельные

Таблица 3. Относительное изменение параметров ВАХ (до и после нанесения), %

Table 3. Relative change in I–V characteristics before and after application, %

Исследуемые параметры	Концентрация УКТ, млн ⁻¹								
	44	119	237	463					
$\Delta I_{\rm K3}$	1,97	1,94	2,01	1,97					
$\Delta V_{\rm xx}$	-0,76	4,11	-0,76	-0,76					
ΔКПД	-8,81	8,21	-11,62	-7,96					
ΔFF	-10,22	2,16	-12,78	-8,92					

УКТ. По этой причине особый интерес представляют результаты исследований параметров кремниевых СЭ с УКТ, полученных при воздействии ультразвука. В табл. 4 представлено относительное изменение $\Delta I_{\rm K3}$, $\Delta V_{\rm xx}$, $\Delta {\rm KII}$ Д, $\Delta {\rm FF}$ от концентрации УКТ при нанесении тонких пленок с ультразвуком и без.

При анализе представленных результатов (табл. 4) видно, что изменение тока короткого замыкания $\Delta I_{\rm K3}$ увеличивается с 1,30 % до 2,65 % при увеличении концентрации УКТ от начальной до максимальной. Что характерно, также наблюдается устойчивое увеличение напряжения холостого хода $\Delta V_{\rm xx}$ от -0,76 % при концентрации УКТ 44 млн⁻¹ до 0,80 % при концентрации УКТ 463 млн⁻¹. Отметим, что эффективность при концентрациях УКТ 44 и 119 млн⁻¹ уменьшилась на 5,68 % и 1,51 %. При концентрациях УКТ 237 и 463 млн⁻¹ наблюдалось положительное увеличение эффективности на 1,84 % и 2,34 %.

Особый интерес представляют исследования изменения $I_{\rm K3}$, $V_{\rm xx}$, КПД, FF с покрытиями ПВБ с УКТ со значениями исходного кремниевого СЭ на различных

Табл	ица	4. Ot	гноси	гелы	но	е из	зме	нени	e	пар	рам	ет	ро	вВ	4λ	K
при	нан	есени	ии тон	ких	пл	енс	эк (с уль	гр	азв	ук	ЭМ	И	без,	%	ó
					-							~				~

 Table 4. Relative change in I–V characteristics before and after application, with US, %

Исследуемые параметры	Концентрация УКТ, млн-1					
	44	119	237	463		
$\Delta I_{\rm K3}$	1,30	1,95	1,30	2,65		
$\Delta V_{\rm xx}$	-0,76	0,77	0,76	0,80		
ΔКПД	-5,68	-1,51	1,84	2,34		
ΔFF	-6,25	-4,11	-0,65	-0,54		

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6



Рис. 2. Зависимости изменений $I_{\rm k3}, U_{\rm XX}, {\rm K}\Pi\Pi$ и FF солнечных элементов с углеродными квантовыми точками от длины волны

Fig. 2. Dependence of the change in I_{sc} , V_{oc} , efficiency and FF of a solar cells with a CQDs under the action of ultrasound on a solar cells without a CQDs on the wavelength

длинах волн излучения. На рис. 2 показаны изменения $I_{\kappa 3}$, V_{xx} , КПД и FF кремниевых СЭ с УКТ (нанесение в присутствии ультразвука) на разных длинах волны падающего излучения.

Результаты исследований показали увеличение КПД на следующих длинах волн: при 365 нм — 38,46 %, при 400 нм — 26,09 %, при 460 нм — 4,46. При длинах волн от 570 нм до 750 нм значение КПД падает на величину от 2,04 % до 7,55 %. Таким образом, можно сделать вывод, что УКТ дают значительный рост КПД в коротковолновой области (365–470 нм) солнечного спектра.

Для объяснения полученного результата был отдельно измерен спектр фотолюминесценции используемых УКТ (рис. 3) с помощью спектрофлуориметра СФЛ МДР-41.

Исходя из того, что пик фотолюминесценции приходится на область 365–420 нм, можно заключить, что изза поглощения в ультрафиолетовой области, именно на длине волны 365 нм имеется максимальное увеличение параметров ВАХ $I_{\rm K3}$, $V_{\rm xx}$, КПД, FF образцов СЭ с покрытиями ПВБ с УКТ. Также функциональные покрытия на основе УКТ позволяют снизить и вредное воздействие ультрафиолетового света на СЭ, что особенно важно при работе в космическом пространстве.

Литература

- Wang Y., Hu A. Carbon quantum dots: synthesis, properties and applications // Journal of Materials Chemistry C. 2014. V. 2. N 34. P. 6921–6939. https://doi.org/10.1039/c4tc00988f
- Gayen B., Palchoudhury S., Chowdhury J. Carbon dots: A mystic star in the world of nanoscience // Journal of Nanomaterials. 2019. P. 3451307. https://doi.org/10.1155/2019/3451307
- Battaglia C., Cuevas A., DeWolf S. High efficiency crystalline silicon solar cells: status and perspectives // Energy & Environmental Science. 2016. V. 5. N 5. P. 1552–1576. https://doi.org/10.1039/ c5ee03380b
- Xu X., Ray R., Gu Y., Ploehn H.J., Gearheart L., Raker K., Scrivens W.A. Electrophoretic analysis and purification of fluorescent single-walled carbon nanotube fragments // Journal of the American Chemical Society. 2004. V. 126. N 40. P. 12736. https://doi. org/10.1021/ja040082h
- Solar Energy Perspectives. International Energy Agency, 2011. 234 p. https://doi.org/10.1787/9789264124585-en





Fig. 3. Photoluminescence spectrum of the synthesized CQDs at an excitation wavelength of 324 nm

Выводы

Можно заключить, что исследованные функциональные покрытия будут актуальны в области ультрафиолетового излучения и могут найти применение в области проектирования и изготовления приборов фотовольтаики, в том числе и в космических приборах. При этом имеется предположение, что углеродные квантовые точки, поглощая ультрафиолетовый свет, снижают деградацию солнечных элементов, что увеличивает срок их службы [15].

Заключение

Сравнительный анализ параметров вольтамперных характеристик кремниевых солнечных элементов с функциональным покрытием поливинилбутираля с углеродными квантовыми точками показал, что изменение тока короткого замыкания $\Delta I_{\rm K3}$ для всех образцов дало устойчивое увеличение в среднем на 2 %.

Результаты исследований продемонстрировали, что на длине волны 365 нм увеличение эффективности составило 38,46 %, при 400 нм — 26,09 %, при 460 нм — 4,46 %, при 540 нм и далее наблюдается небольшой спад эффективности. Такую закономерность можно объяснить тем, что основной пик люминесценции покрытий с углеродными квантовыми точками находится в области 350–450 нм.

References

- Wang Y., Hu A. Carbon quantum dots: synthesis, properties and applications. *Journal of Materials Chemistry C*, 2014, vol. 2, no. 34, pp. 6921–6939. https://doi.org/10.1039/c4tc00988f
- Gayen B., Palchoudhury S., Chowdhury J. Carbon dots: A mystic star in the world of nanoscience. *Journal of Nanomaterials*, 2019, pp. 3451307. https://doi.org/10.1155/2019/3451307
- Battaglia C., Cuevas A., DeWolf S. High efficiency crystalline silicon solar cells: status and perspectives. *Energy & Environmental Science*, 2016, vol. 5, no. 5, pp. 1552–1576. https://doi.org/10.1039/ c5ee03380b
- Xu X., Ray R., Gu Y., Ploehn H.J., Gearheart L., Raker K., Scrivens W.A. Electrophoretic analysis and purification of fluorescent singlewalled carbon nanotube fragments. *Journal of the American Chemical Society*, 2004, vol. 126, no. 40, pp. 12736. https://doi.org/10.1021/ ja040082h
- Solar Energy Perspectives. International Energy Agency, 2011, 234 p. https://doi.org/10.1787/9789264124585-en

- Sun Y.-P., Zhou B., Lin Y., Wang W., Fernando K.S., Pathak P., Meziani B.A., Harruff X., Wang X., Wang H., Luo P.G., Yang H., Kose M.E., Chen B., Veca L.M. Quantum-sized carbon dots for bright and colorful photoluminescence // Journal of the American Chemical Society. 2006. V. 128. N 24. P. 7756–7757. https://doi.org/10.1021/ ja062677d
- Baker S.N., Baker G.A. Luminescent carbon nanodots: emergent nanolights // Angewandte Chemie International Edition. 2010. V. 49. N 38. P. 6726–6744. https://doi.org/10.1002/anie.200906623
- Li H., Kang Z., Liu Y., Lee S.-T. Carbon nanodots: synthesis, properties and applications // Journal of Materials Chemistry. 2012. V. 22. N 46. P. 24230–24253. https://doi.org/10.1039/c2jm34690g
- Gaponenko S., Demir H.V. Applied Nanophotonics. Cambridge University Press, 2019. 433 p.
- Semiconductor and Metal Nanocrystals: Synthesis and Electronic and Optical Properties / ed. by V. Klimov. CRC Press, 2004. 500 p.
- Bibekananda D., Karak N. A green and facile approach for the synthesis of water soluble fluorescent carbon dots from banana juice // RSC Advances. 2013. V. 3. N 22. P. 8286–8290. https://doi. org/10.1039/c3ra00088e
- Gao N., Huang L., Li T., Song J., Hu H., Liu Y., Ramakrishna S. Application of carbon dots in dye-sensitized solar cells: A review // Journal of Applied Polymer Science. 2020. V. 137. N 10. P. 48443. https://doi.org/10.1002/app.48443
- Shejale K.P., Jaiswal A., Kumar A., Saxena S., Shukla S. Nitrogen doped carbon quantum dots as Co-active materials for highly efficient dye sensitized solar cells // Carbon. 2021. V. 183. P. 169–175. https:// doi.org/10.1016/j.carbon.2021.06.090
- Sinha A., Qian J., Moffitt S.L., Hurst K., Terwilliger K., Miller D.C., Schelhas L.T., Hacke P. UV-induced degradation of high-efficiency silicon PV modules with different cell architectures // Progress in Photovoltaics. 2023. V. 31. N 1. P. 36-51. https://doi.org/10.1002/ pip.3606
- Sun Z., Yan F., Xu J., Zhang H., Chen L. Solvent-controlled synthesis strategy of multicolor emission carbon dots and its applications in sensing and light-emitting devices // Nano Research. 2022. V. 15. N 1. P. 414–422. https://doi.org/10.1007/s12274-021-3495-8

Авторы

Корчагин Владимир Николаевич — младший научный сотрудник, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355017, Российская Федерация; аспирант, Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) им. Платова, Ростовская область, Новочеркасск, 346428, Российская Федерация, https://orcid. org/0000-0002-8262-4364, vodnomlice@gmail.com

Сысоев Игорь Александрович — доктор технических наук, доцент, директор научно-образовательного центра фотовольтаики и нанотехнологии, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355017, Российская Федерация, sc 32467535800, https://orcid.org/0000-0001-5415-0782, eianpisia@yandex.ru

Ратушный Виктор Иванович — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой, Волгодонский инженерно-технический институт – филиал Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», Волгодонск, 347360, Российская Федерация, вс 6603218775, https://orcid.org/0000-0002-5701-6279, viratush@mail.ru

Митрофанов Даниил Вячеславович — младший научный сотрудник, ассистент преподавателя, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355017, Российская Федерация, 57226807601, https://orcid.org/0009-0009-2137-4312, danik-20@ yandex.ru

Чапура Олег Михайлович — инженер-исследователь, Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, 355017, Российская Федерация, № 57226807601, https://orcid.org/0000-0002-6691-0010, ochapura@ncfu.ru

Статья поступила в редакцию 05.07.2023 Одобрена после рецензирования 29.09.2023 Принята к печати 10.11.2023

- Sun Y.-P., Zhou B., Lin Y., Wang W., Fernando K.S., Pathak P., Meziani B.A., Harruff X., Wang X., Wang H., Luo P.G., Yang H., Kose M.E., Chen B., Veca L.M. Quantum-sized carbon dots for bright and colorful photoluminescence. *Journal of the American Chemical Society*, 2006, vol. 128, no. 24, pp. 7756–7757. https://doi. org/10.1021/ja062677d
- Baker S.N., Baker G.A. Luminescent carbon nanodots: emergent nanolights. *Angewandte Chemie International Edition*, 2010, vol. 49, no. 38, pp. 6726–6744. https://doi.org/10.1002/anie.200906623
- Li H., Kang Z., Liu Y., Lee S.-T. Carbon nanodots: synthesis, properties and applications. *Journal of Materials Chemistry*, 2012, vol. 22, no. 46, pp. 24230–24253. https://doi.org/10.1039/c2jm34690g
- 9. Gaponenko S., Demir H.V. *Applied Nanophotonics*. Cambridge University Press, 2019. 433 p.
- Semiconductor and Metal Nanocrystals: Synthesis and Electronic and Optical Properties. Ed. by V. Klimov. CRC Press, 2004, 500 p.
- Bibekananda D., Karak N. A green and facile approach for the synthesis of water soluble fluorescent carbon dots from banana juice. *RSC Advances*, 2013, vol. 3, no. 22, pp. 8286–8290. https://doi. org/10.1039/c3ra00088e
- Gao N., Huang L., Li T., Song J., Hu H., Liu Y., Ramakrishna S. Application of carbon dots in dye-sensitized solar cells: A review. *Journal of Applied Polymer Science*, 2020, vol. 137, no. 10, pp. 48443. https://doi.org/10.1002/app.48443
- Shejale K.P., Jaiswal A., Kumar A., Saxena S., Shukla S. Nitrogen doped carbon quantum dots as Co-active materials for highly efficient dye sensitized solar cells. *Carbon*, 2021, vol. 183, pp. 169–175. https://doi.org/10.1016/j.carbon.2021.06.090
- Sinha A., Qian J., Moffitt S.L., Hurst K., Terwilliger K., Miller D.C., Schelhas L.T., Hacke P. UV-induced degradation of high-efficiency silicon PV modules with different cell architectures. *Progress in Photovoltaics*, 2023, vol. 31, no. 1, pp. 36-51. https://doi.org/10.1002/ pip.3606
- Sun Z., Yan F., Xu J., Zhang H., Chen L. Solvent-controlled synthesis strategy of multicolor emission carbon dots and its applications in sensing and light-emitting devices. *Nano Research*, 2022, vol. 15, no. 1, pp. 414–422. https://doi.org/10.1007/s12274-021-3495-8

Authors

Vladimir N. Korchagin — Junior Researcher, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355017, Russian Federation; PhD Student, Platov South-Russian State Polytechnic University (NPI), Rostov region, Novocherkassk, 346428, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0002-8262-4364, odnomlice@gmail.com

Igor A. Sysoev — D.Sc., Associate Professor, Director, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355017, Russian Federation, Sc 32467535800, https://orcid.org/0000-0001-5415-0782, eianpisia@ yandex.ru

Victor I. Ratushny — D.Sc. (Physics & Mathematics), Professor, Head of Department, Volgodonsk Engineering and Technology Institute National Research Nuclear University MEPhI, Rostov region, Volgodonsk, 347360, Russian Federation, sc 6603218775, https://orcid.org/0000-0002-5701-6279, viratush@mail.ru

Daniil V. Mitrofanov — Junior Researcher, Lecturer Assistant, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355017, Russian Federation, SC 57226807601, https://orcid.org/0009-0009-2137-4312, danik-20@ yandex.ru

Oleg M. Chapura — Research Engineer, North-Caucasus Federal University, Stavropol, 355017, Russian Federation, sc 57226807601, https://orcid.org/0000-0002-6691-0010, ochapura@ncfu.ru

Received 05.07.2023 Approved after reviewing 29.09.2023 Accepted 10.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

NHOOPMAUNOHHIJX TEXHONOFNÄ, MEXAHNKN N ONTUKN

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1128-1135 УДК 519.688, 004.942

Численный алгоритм поиска оптимального состава реагирующей смеси на основе кинетической модели реакции

Евгения Викторовна Антипина¹[∞], Светлана Анатольевна Мустафина², Андрей Федорович Антипин³

1,2 Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация

³ Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак, 453103, Российская Федерация

¹ stepashinaev@ya.ru^{\equiv}, https://orcid.org/0000-0002-8458-9638

² mustafina sa@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-6363-1665

³ andrejantipin@ya.ru, https://orcid.org/0000-0002-9151-4167

Аннотация

Введение. Представлены результаты разработки алгоритма поиска оптимальных начальных концентраций веществ химической реакции. Алгоритм сочетает комбинацию методов оптимизации с теоретическими основами моделирования химических реакций в части построения их кинетических моделей. Математическое описание динамики концентраций реагирующих веществ во времени представлено в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений, начальные условия которой заданы значениями начальных концентраций реагентов. Метод. В общем виде сформулирована задача определения оптимального состава реагирующей смеси. Задача содержит ограничения, накладываемые на значения начальных концентраций веществ и на их начальную суммарную концентрацию. Для решения поставленной задачи применены методы штрафов и Хука–Дживса. Описана функция штрафов, позволяющая свести исходную задачу к задаче без ограничений. Основные результаты. Сформулирован пошаговый алгоритм поиска оптимальных начальных концентраций химической реакции. Проведен вычислительный эксперимент для каталитической реакции аминометилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина. Приведена кинетическая модель реакции, на основе которой сформулирована оптимизационная задача поиска значений начальных концентраций реагентов для получения наибольшего выхода целевого продукта в конце реакции. Вычислены оптимальные начальные концентрации исходных веществ для разной продолжительности реакции и при различных значениях температуры. Обсуждение. Разработанный численный алгоритм определения оптимальных начальных концентраций реагентов учитывает физико-химические особенности поставленной задачи и может быть применен при исследовании сложных химических реакций, содержащих большое количество начальных и промежуточных веществ. Его применение позволяет на этапе компьютерного эксперимента определить закономерности протекания химической реакции, не прибегая к проведению лабораторного опыта, что существенно экономит материальные и временные затраты исследователя.

Ключевые слова

оптимальные начальные концентрации, метод штрафов, метод Хука-Дживса, кинетическая модель реакции

Благодарности

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2023-0002).

Ссылка для цитирования: Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Численный алгоритм поиска оптимального состава реагирующей смеси на основе кинетической модели реакции // Научнотехнический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1128–1135. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1128-1135

[©] Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф., 2023

Numerical algorithm for finding the optimal composition of the reacting mixture on the basis of the reaction kinetic model

Evgenia V. Antipina¹[∞], Svetlana A. Mustafina², Andrey F. Antipin³

^{1,2} Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation

³ Sterlitamak branch of Ufa University of Science and Technology, Sterlitamak, 453103, Russian Federation

¹ stepashinaev@ya.ru^{\boxdot}, https://orcid.org/0000-0002-8458-9638

² mustafina sa@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-6363-1665

³ andrejantipin@ya.ru, https://orcid.org/0000-0002-9151-4167

Abstract

The results of developing an algorithm for searching for optimal initial concentrations of substances in a chemical reaction are presented. The algorithm combines a combination of optimization methods with the theoretical foundations of modeling chemical reactions in terms of constructing their kinetic models. A mathematical description of the dynamics of the concentrations of reactants over time is presented in the form of a system of ordinary differential equations the initial conditions of which are specified by the values of the initial concentrations of the reactants. The problem of determining the optimal composition of the reacting mixture is formulated in general terms. The problem contains restrictions imposed on the values of the initial concentrations of substances and on their initial total concentration. To solve the problem, the penalty method and the Hooke-Jeeves method were used. A penalty function is described that allows one to reduce the original problem to a problem without restrictions. A step-by-step algorithm for searching for optimal initial concentrations of a chemical reaction is formulated. A computational experiment was carried out for the catalytic reaction of aminomethylation of thiols using tetramethylmethanediamine. A kinetic model of the reaction is presented on the basis of which an optimization problem is formulated to find the values of the initial concentrations of reagents to obtain the highest yield of the target product at the end of the reaction. The optimal initial concentrations of the starting substances were calculated for different reaction durations and at different temperatures. The developed numerical algorithm for determining the optimal initial concentrations of reagents takes into account the physicochemical features of the problem and can be used in the study of complex chemical reactions containing a large number of initial and intermediate substances. Its use makes it possible to determine the patterns of a chemical reaction at the stage of a computer experiment, without resorting to laboratory experiments, which significantly saves the material and time costs of the researcher.

Keywords

optimal initial concentrations, penalty method, Hooke-Jeeves method, reaction kinetic model

Acknowledgements

This research was funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (scientific code FZWU-2023-0002).

For citation: Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Numerical algorithm for finding the optimal composition of the reacting mixture on the basis of the reaction kinetic model. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1128–1135 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1128-1135

Введение

В настоящее время математическое моделирование каталитических процессов широко применяется для решения практических задач химической технологии [1–8]. Определить значения концентраций реагирующих веществ в любой момент времени возможно с помощью кинетической модели химической реакции. Модель включает в себя перечень реагентов, отдельных стадий их превращения, уравнение скоростей стадий, зависящих от концентраций реагентов и температуры. В качестве условий протекания химической реакции, подлежащих оптимизации для получения заданного уровня количественных и качественных показателей процесса, можно рассматривать температуру, давление, состав реакционной смеси, скорость ее подачи, длительность процесса и т. д.

Практически значимой задачей исследования каталитических реакций является определение показателей процесса в зависимости от начального состава реакционной смеси. Изменяя начальные концентрации реагентов, можно добиться наибольшего выхода продуктов реакции, изменить интенсивность протекания или повысить экономические показатели эффективности процесса. Математическое описание изменения концентраций реагирующих веществ во времени можно представить в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений, начальные условия которой определяют начальный состав реагирующей смеси. Решение данной системы представляет собой решение прямой кинетической задачи. Путем формализации задачи поиска начальных концентраций химической реакции можно на основе ее кинетической модели определить оптимальное соотношение регентов, не прибегая к проведению многократных лабораторных экспериментов, что существенно экономит материальные и временные ресурсы исследователя.

Задача определения оптимальных начальных концентраций реагентов имеет ряд особенностей.

Нелинейность модели динамики процесса, обусловленная экспоненциальной зависимостью констант скоростей от температуры, ограничивает применимость некоторых методов оптимизации, например, линейного программирования [3, 4, 9].

Наличие промежуточных веществ приводит к увеличению размерности системы дифференциальных уравнений, описывающей протекание процесса, поскольку количество уравнений модели задается количеством веществ реакционной смеси. Это создает трудности в применении метода динамического программирования ввиду ресурсоемких вычислений [5–7].

Наличие ограничений на значения начальных концентраций веществ ведет к применению численных методов поиска условного экстремума.

Наличие ограничения на начальную суммарную концентрацию веществ. В процессе поиска начальных концентраций необходимо контролировать выход их суммы за пределы заданного значения.

В работе [10] приведен алгоритм расчета оптимальных начальных концентраций веществ химических реакций на основе эвристического метода искусственных иммунных систем. Однако недостатком данного алгоритма является отсутствие этапа проверки выполнения условия равенства суммы рассчитанных начальных концентраций заданному значению. Алгоритм применим только для реакций, в которых содержатся два исходных вещества, тогда как в большинстве случаев сложные химические превращения включают в себя три и более исходных веществ.

Цель настоящей работы — разработка численного алгоритма определения оптимального состава сложной каталитической реакции, состоящей из трех и более веществ. Алгоритм должен учитывать перечисленные физико-химические особенности задачи. Для учета ограничений, накладываемых на значения начальных концентраций веществ и на их суммарную концентрацию предложено применить метод штрафов [11–15], который позволяет перейти к задаче поиска безусловного экстремума, а затем решить задачу без ограничений с помощью метода Хука–Дживса [16–20].

Постановка задачи

Пусть механизм сложной химической реакции представлен *m* стадиями

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_{si} X_i \to \sum_{i=1}^{n} \beta_{si} X_i, s = \overline{1, m},$$
(1)

где X_i — вещества, участвующие в реакции; α_{si} , β_{si} — стехиометрические коэффициенты веществ.

Опишем динамику концентраций веществ X_i реакции (1) системой дифференциальных уравнений вида:

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{s=1}^m \gamma_{si} w_s, \ i = \overline{1, n},\tag{2}$$

с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^0, (3)$$

где x_i — концентрация *i*-го вещества; $t \in [0, t_1]$ — время реакции; $\gamma_{is} = \beta_{is} - \alpha_{si}$; w_s — скорость *s*-й стадии реакции.

Скорость стадии определим согласно закону действующих масс:

$$w_s(\mathbf{x}, T) = k_s(T) \prod_{i=1}^n x_i^{\alpha_{si}},$$
(4)

где $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)$ — вектор концентраций веществ; *T* — температура реакции; $k_s(T)$ — константа скорости *s*-й стадии реакции (1), рассчитываемая по уравнению Аррениуса:

$$k_s(T) = k_s^0 \exp\left(-\frac{E_s}{RT}\right), s = \overline{1, m},$$
(5)

где k_s^0 — предэкспоненциальный множитель; E_s — энергия активации *s*-й стадии; R — универсальная газовая постоянная.

Пусть значения концентраций веществ выражены в мольных долях. Тогда в начальный момент времени будет выполнено соотношение

$$\sum_{i=1}^{n} x_i^0 = 1.$$
 (6)

При этом существуют следующие ограничения на значения начальных концентраций веществ:

$$0 \le x_i^0 \le 1, \, i = \overline{1, n}.\tag{7}$$

Рассмотрим задачу оптимизации функции вида:

$$F(\mathbf{x}^0) = \varphi(\mathbf{x}(t_1)), \tag{8}$$

где $\varphi(\mathbf{x}(t_1))$ — непрерывно-дифференцируемая функция; $\mathbf{x}(t_1)$ — вектор концентраций веществ в конце реакции.

Задача оптимизации начальных концентраций каталитической реакции (1) заключается в поиске вектора начальных концентраций веществ $\mathbf{x}^0 = (x_1^0, x_2^0, ..., x_n^0)$, при котором, с учетом условий (6), (7), функция (8) достигнет минимального значения.

Алгоритм поиска оптимального начального состава реакционной смеси

Задача оптимизации начальных концентраций (1)–(8) является задачей поиска условного экстремума функции (8), поскольку имеются условия (6), (7), ограничивающие область поиска решения. Исходя из этого, применим метод штрафов, позволяющий свести сформулированную задачу к задаче без ограничений.

Рассмотрим вспомогательную функцию

$$G(\mathbf{x}^0) = F(\mathbf{x}^0) + J(\mathbf{x}^0, q^k) \to \min, \qquad (9)$$

где $J(\mathbf{x}^0, q^k)$ — функция штрафов; q^k — параметр штрафа; k — номер итерации.

Значение функции штрафов $J(\mathbf{x}^0, q^k)$ равно нулю, если ограничения (6), (7) выполняются. В противном случае $J(\mathbf{x}^0, q^k) > 0$. Если ограничения (6), (7) нарушены и $q^k \to \infty$ при $k \to \infty$, то функция штрафов $J(\mathbf{x}^0, q^k) \to \infty$ при $k \to \infty$.

Введем в рассмотрение функции:

$$f(\mathbf{x}^0) = 1 - \sum_{i=1}^n x_i^0, \, p_i(\mathbf{x}^0) = -x_i^0, \, g_i(\mathbf{x}^0) = x_i^0 - 1, \, i = \overline{1, n}.$$

Тогда условия (6), (7) запишем в следующем виде:

$$f(\mathbf{x}^0) = 0, p_i(\mathbf{x}^0) \le 0, g_i(\mathbf{x}^0) \le 0, i = 1, n$$

Для ограничения типа равенств $f(\mathbf{x}^0) = 0$ применим квадратичный штраф, а для типа неравенств $p_i(\mathbf{x}^0) \le 0$,

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

 $g_i(\mathbf{x}^0) \le 0, i = \overline{1, n}$ используем квадрат срезки. В результате получим функцию штрафов для задачи (1)–(8) в виде:

$$J(\mathbf{x}^{0}, q^{k}) = \frac{q^{k}}{2} \left([f(\mathbf{x}^{0})]^{2} + \sum_{i=1}^{n} [\max\{0, p_{i}(\mathbf{x}^{0})\}]^{2} + \sum_{i=1}^{n} [\max\{0, g_{i}(\mathbf{x}^{0})\}]^{2} \right).$$
(10)

Для решения задачи оптимизации (1)–(5), (10) без ограничений применим метод Хука–Дживса. Процедура поиска решения оптимизационной задачи с помощью данного метода включает в себя два этапа: исследующий поиск и ускоряющий поиск по образцу [17]. Найденный вектор начальных концентраций $\mathbf{x}^0 = (x_1^0, x_2^0, ..., x_n^0)$, при котором функция (9) принимает наименьшее значение, является начальным для следующей итерации метода штрафов.

Перечислим шаги алгоритма определения оптимальных начальных концентраций химической реакции.

Шаг 1. Задать параметры для метода штрафов: номер текущей итерации k = 0, начальное значение штрафа q^0 , параметр для увеличения штрафа r (рекомендуется выбрать число от 4 до 10 [17]), константу $\varepsilon_1 > 0$ для окончания работы алгоритма.

Шаг 2. Задать параметры метода Хука–Дживса: начальный вектор концентраций $\mathbf{x}_0^0 = (x_{01}^0, x_{02}^0, \dots, x_{0n}^0)$; величины шагов по координатным направлениям h_1, h_2 , \dots, h_n ; константу $\varepsilon_2 > 0$ для окончания работы метода Хука–Дживса ($h_i \ge \varepsilon_2, i = \overline{1, n}$); ускоряющий множитель $\lambda > 0$; параметр уменьшения шага p.

Шаг 3. Принять, что $\mathbf{y} = \mathbf{x}_k^0$. Установить номер текущей координаты вектора начальных концентраций равным 1: *i* = 1.

Шаг 4. Решить прямую кинетическую задачу с начальными условиями $\mathbf{x}_k^0 = (x_{k1}^0, x_{k2}^0, ..., x_{kn}^0)$. Вычислить значение целевой функции $G(\mathbf{x}_k^0)$.

Шаг 5. Решить прямую кинетическую задачу с начальными условиями $\mathbf{x}_{k+}^0 = (x_{k1}^0, ..., x_{ki}^0, +h_i, ..., x_{kn}^0)$. Вычислить значение целевой функции $G(\mathbf{x}_{k+}^0)$.

Шаг 6. Проверить, является ли шаг h_i удачным. Если $G(\mathbf{x}_{k+}^0) < G(\mathbf{x}_k^0)$, то положить $\mathbf{x}_k^0 = \mathbf{x}_{k+}^0$ и перейти к шагу 10. Иначе перейти к шагу 7.

Шаг 7. Решить прямую кинетическую задачу с начальными условиями $\mathbf{x}_{k-}^0 = (x_{k1}^0, \ldots, x_{ki}^0 - h_i, \ldots, x_{kn}^0)$. Вычислить значение функции $G(\mathbf{x}_{k-}^0)$.

Шаг 8. Проверить условие, является ли шаг h_i удачным в противоположном направлении. Если $G(\mathbf{x}_{k-}^0) < G(\mathbf{x}_k^0)$, то положить $\mathbf{x}_k^0 = \mathbf{x}_{k-}^0$ и перейти к шагу 10. Иначе перейти к шагу 9.

Шаг 9. Если шаг h_i неудачный в обоих направлениях, то оставить вектор начальных концентраций \mathbf{x}_k^0 без изменений.

Шаг 10. Если рассмотрены все координаты (i = n) то проверить, является ли исследующий поиск удачным. Если $G(\mathbf{x}_k^0) < G(\mathbf{y})$, т. е. произошло уменьшение значения целевой функции, то исследующий поиск прошел успешно, и следует перейти к шагу 11. В противном случае перейти к шагу 12.

Шаг 11. Провести поиск по образцу. Принять, что $\mathbf{z} = \mathbf{x}_k^0$, $\mathbf{x}_k^0 = \mathbf{z} + \lambda(\mathbf{z} - \mathbf{y})$ и перейти к шагу 3.

Шаг 12. Проверить условие окончания работы алгоритма метода Хука–Дживса. Если для всех i (i = 1, n) выполнено неравенство

$$h_i \le \varepsilon_2,$$
 (11)

то перейти к шагу 13. В противном случае уменьшить значение шага $h_i = \frac{h_i}{p}$ для тех *i*, для которых не выполнено неравенство (11), и перейти к шагу 3.

Шаг 13. Проверить условие окончания поиска решения. Если $J(\mathbf{x}_k^0, q^k) > \varepsilon_1$, то определить $q^{k+1} = rq^k$, k = k + 1 и перейти к шагу 3. Иначе остановить поиск решения. В качестве решения задачи определения оптимальных начальных концентраций реакции принять последний вектор \mathbf{x}_k^0 .

Вычислительный эксперимент

Используя предложенный в разделе «Алгоритм поиска оптимального начального состава реакционной смеси» алгоритм, вычислим оптимальные начальные концентрации реагентов для реакции аминометилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина. Экспериментальные исследования данной реакции проведены в Уфимском федеральном исследовательском центре Российской академии наук (РАН) в лаборатории гетероатомных соединений. Математическое описание реакции получено на основе экспериментальных данных в Институте нефтехимии и катализа РАН (г. Уфа) в лаборатории математической химии.

Схема реакции аминометилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина и соответствующие уравнения скоростей стадий имеют вид [21]:

$$X_{1} + X_{2} \to X_{3},$$

$$X_{3} + X_{4} \to X_{2} + X_{5} + X_{6},$$

$$w_{1}(x, T) = k_{1}(T)x_{1}x_{2},$$

$$w_{2}(x, T) = k_{2}(T)x_{3}x_{4},$$
(12)

где X₁ — N₂(CH₃)₄; X₂ — Sm; X₃ — N₂(CH₃)₄·[Sm]; X₄ — HSC₅H₁₁; X₅ — (CH₃)₂NSC₅H₁₁; X₆ — (CH₃)₂NH; **x** = (x_1 , ..., x_6) — вектор концентраций веществ реакции (моль/л); **k** = (k_1 , k_2) — вектор констант скоростей стадий (л/(моль·ч)), рассчитываемых по уравнению Аррениуса.

Динамику концентраций веществ реакции аминометилирования тиолов опишем системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx_1}{dt} = -w_1, \qquad \frac{dx_4}{dt} = -w_2,$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -w_1 + w_2, \qquad \frac{dx_5}{dt} = w_2,$$

$$\frac{dx_3}{dt} = w_3 - w_4, \qquad \frac{dx_6}{dt} = w_2,$$
(13)

с начальными условиями

$$x_1(0) = x_1^0, x_2(0) = x_2^0, x_4(0) = x_4^0, x_i(0) = 0, i = 3, 5, 6.$$
 (14)

Кинетические параметры данной реакции приведены в работе [21].

Исходные вещества реакции синтеза аминометилирования тиолов: X₁, X₂, X₄. Пусть концентрации веществ выражены в мольных долях. Тогда будут выполнены условия:

$$0 < x_i^0 < 1, \, i = 1, \, 2, \, 4, \tag{15}$$

$$x_1^0 + x_2^0 + x_4^0 = 1. (16)$$

Начальные концентрации остальных веществ равны нулю.

Найдем вектор начальных концентраций $\mathbf{x}^0 = (x_1^0, x_2^0, x_4^0)$ веществ X₁, X₂, X₄ который удовлетворяет условиям (15), (16) и обеспечивает в конце реакции максимальное значение концентрации продукта X₅:

$$F(\mathbf{x}^0) = x_5(t_1) \to \max. \tag{17}$$

Для решения поставленной задачи на языке программирования Delphi написана программа, реализующая разработанный алгоритм. Для получения численного решения прямой кинетической задачи применен метод Рунге–Кутты 4-го порядка. В ходе решения задачи (12)–(17) проведена серия вычислительных экспериментов для различных значений температур и разной продолжительности реакции (табл. 1). Алгоритм применен со следующими параметрами: начальное значение штрафа $q^0 = 1$, параметр для увеличения штрафа r = 10, начальный вектор концентраций $\mathbf{x}_0^0 = (0, 0, 0)$, шаги по координатным направлениям $h_1 = h_2 = h_4 = 0,1$, ускоряющий множитель $\lambda = 1$, параметр уменьшения шага p = 2, параметры завершения вычислений $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-4}$.

Из табл. 1 видно, что с увеличением времени реакции повышается значение концентрации целевого продукта x_5 , что связано с увеличением времени контактирования реагентов. С повышением температуры значение концентрации x_5 в конце реакции также возрастает, так как повышается интенсивность химических превращений.

Динамика концентрации целевого вещества x₅ при найденных начальных концентрациях показана на рисунке.

Решим прямую кинетическую задачу при других начальных концентрациях реагентов (табл. 2). На основании полученных расчетов видно, что найденные с помощью алгоритма начальные концентрации исходных веществ обеспечивают наибольшее значение концентрации целевого продукта реакции X₅, что свидетельствует о корректной работе алгоритма.

Таблица 1. Результаты решения задачи поиска оптимальных начальных концентраций реакции аминометилирования тиолов, мольная доля

Table 1. Results of solving the problem of finding the optimal initial concentrations of the reaction of aminomethylation of thiols, mole fraction

<i>Т</i> , К	<i>t</i> ₁ , ч	x_{1}^{0}	x_{2}^{0}	x_{4}^{0}	$x_5(t_1)$
300	1	0,389	0,216	0,395	0,280
	2	0,422	0,153	0,425	0,358
330	1	0,456	0,076	0,468	0,430
	2	0,474	0,046	0,480	0,459



Рисунок. Динамика концентрации x_5 для t_1 : 1 ч (*a*) и 2 ч (*b*) при температурах 330 К (кривая *l*) и 300 К (кривая *2*) *Figure*. Dynamics of x_5 concentration t_1 : 1 hour (*a*) and 2 hour (*b*) at temperatures 330 K (curve *l*) and 300 K (curve *2*)

<i>Т</i> , К	<i>t</i> ₁ , ч	x_1^0	x_{2}^{0}	x_{4}^{0}	$x_5(t_1)$
200		0,389	0,216	0,395	0,280
		0,400	0,200	0,400	0,279
	1	0,300	0,200	0,500	0,252
		0,500	0,200	0,300	0,249
		0,500	0,100	0,400	0,222
		0,400	0,100	0,500	0,225
		0,450	0,100	0,450	0,227
300	2	0,422	0,153	0,425	0,358
		0,400	0,200	0,400	0,351
		0,300	0,200	0,500	0,296
		0,500	0,200	0,300	0,295
		0,500	0,100	0,400	0,329
		0,400	0,100	0,500	0,332
		0,450	0,100	0,450	0,339
	1	0,456	0,076	0,468	0,430
		0,400	0,200	0,400	0,381
		0,300	0,200	0,500	0,300
		0,500	0,200	0,300	0,300
		0,500	0,100	0,400	0,396
		0,400	0,100	0,500	0,399
330		0,450	0,100	0,450	0,425
	2	0,474	0,046	0,480	0,459
		0,400	0,200	0,400	0,391
		0,300	0,200	0,500	0,300
		0,500	0,200	0,300	0,300
		0,500	0,100	0,400	0,400
		0,400	0,100	0,500	0,400
		0,450	0,100	0,450	0,439

Таблица 2. Значение концентрации x_5 при различных наборах начальных концентраций исходных веществ, мольная доля *Table 2*. The value of the concentration x_5 for different sets of initial concentrations of the starting substances, mole fraction

Заключение

Разработанный численный алгоритм может быть использован для определения оптимальных начальных концентраций каталитических реакций. Алгоритм основан на применении метода штрафов, с помощью которого осуществлен переход к задаче без ограничений, и метода Хука–Дживса для решения задачи безусловной оптимизации. Алгоритм учитывает такие особенности задачи, как наличие ограничений на значения начальных концентраций веществ и ограничения на начальную суммарную концентрацию веществ. Это позволяет применять его для сложных химических реакций, состоящих из большого количества начальных и промежуточных веществ.

Проведен вычислительный эксперимент для реакции аминометилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина. Определены оптимальные начальные концентрации реагентов для реакции продолжительностью 1 и 2 часа при разных значениях температуры. Сравнение полученных значений концентрации целевого продукта реакции со значениями, вычисленными при других начальных концентрациях, показало, что рассчитанные с помощью алгоритма наборы начальных концентраций реагентов обеспечивают достижение наибольшего значения концентрации целевого продукта реакции.

Литература

- Ziyatdinov N.N., Emel'yanov I.I., Lapteva T.V., Ryzhova A.A., Ignat'ev A.N. Method of automated synthesis of optimal heat exchange network (HEN) based on the principle of fixation of variables // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2020. V. 54. N 2. P. 258–276. https://doi.org/10.1134/S0040579520020189
- Lindborg H., Eide V., Unger S., Henriksen S.T., Jakobsen H.A. Parallelization and performance optimization of a dynamic PDE fixed bed reactor model for practical applications // Computers & Chemical Engineering. 2004. V. 28. N 9. P. 1585–1597. https://doi. org/10.1016/j.compchemeng.2003.12.009
- Sahinidis N.V., Grossmann I.E. Reformulation of the multiperiod MILP model for capacity expansion of chemical processes // Operations Research. 1992. V. 40. N 1-supplement-1. P. 127–144. https://doi.org/10.1287/opre.40.1.S127
- Royce N.J. Linear programming applied to production planning and operation of a chemical process // Operational Research Quarterly (1970–1977). 1970. V. 21. N 1. P. 61–80. https://doi. org/10.2307/3007719
- Biegler L.T. Integrated optimization strategies for dynamic process operations // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2017. V. 51. N 6. P. 910–927. https://doi.org/10.1134/S004057951706001X
- Dadebo S.A., Mcauley K.B. Dynamic optimization of constrained chemical engineering problems using dynamic programming // Computers & Chemical Engineering. 1995. V. 19. N 5. P. 513–525. https://doi.org/10.1016/0098-1354(94)00086-4
- Pan Y., Fei Z.-S., Zhao L., Liang J. Dynamic optimization for chemical process based on improved iterative dynamic programming algorithm // Journal of East China University of Science and Technology. 2013. V. 39. N 1. P. 61–65.
- Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Algorithm of solving a multiobjective optimization problem on the basis of a kinetic chemical reaction model // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. 2021. V. 57. N 6. P. 668–674. https://doi.org/10.3103/ S8756699021060029
- Santos L.-R., Villas-Bôas F., Oliveira A.R.L., Perin C. Optimized choice of parameters in interior-point methods for linear programming // Computational Optimization and Applications. 2019. V. 73. N 2. P. 535–574. https://doi.org/10.1007/s10589-019-00079-9
- Антипина Е.В., Антипин А.Ф. Алгоритм расчета оптимальных начальных концентраций веществ химических реакций // Вестник Технологического университета. 2017. Т. 20. № 13. С. 84–87.
- Smith S., Mayne D.Q. Exact penalty algorithm for optimal control problems with control and terminal constraints // International Journal of Control. 1988. V. 48. N 1. P. 257–271. https://doi. org/10.1080/00207178808906173
- Gugat M., Zuazua E. Exact penalization of terminal constraints for optimal control problems // Optimal Control Applications and Methods. 2016. V. 37. N 6. P. 1329–1354. https://doi.org/10.1002/ oca.2238
- Gao X., Zhang X., Wang Y. A simple exact penalty function method for optimal control problem with continuous inequality constraints // Abstract and Applied Analysis. 2014. V. 2014. P. 752854. https://doi. org/10.1155/2014/752854
- Malisani P., Chaplais F., Petit N. An interior penalty method for optimal control problems with state and input constraints of nonlinear systems // Optimal Control Applications and Methods. 2016. V. 37. N 1. P. 3–33. https://doi.org/10.1002/oca.2134
- Pan L.P., Teo K.L. Linear-nonquadratic optimal control problems with terminal inequality constraints // Journal of Mathematical Analysis and Applications. 1997. V. 212. N 1. P. 176–189. https://doi. org/10.1006/jmaa.1997.5489
- Бушуев А.Ю., Ряузов С.С. Оптимизация конструкции твердотопливного модельного газогенератора // Математическое моделирование и численные методы. 2019. № 4(24). С. 3–14. https://doi. org/10.18698/2309-3684-2019-4-314
- 17. Пантелеев А.В., Летова Т.А. Методы оптимизации в примерах и задачах: учебное пособие. М.: Высшая школа, 2005. 544 с.
- Фицов В.В. Программная методика оценки эффективности аппаратного состава серверов системы глубокой инспекции пакетов с использованием модернизированного метода Хука-Дживса // Труды учебных заведений связи. 2021. Т. 7. № 1. С. 132–140. https://doi.org/10.31854/1813-324X-2021-7-1-132-140
- Сергеев А.И., Крылова С.Е., Шамаев С.Ю., Мамуков Т.Р. Алгоритмы параметрического синтеза, применяемые при проек-

References

- Ziyatdinov N.N., Emel'yanov I.I., Lapteva T.V., Ryzhova A.A., Ignat'ev A.N. Method of automated synthesis of optimal heat exchange network (HEN) based on the principle of fixation of variables. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2020, vol. 54, no. 2, pp. 258–276. https://doi.org/10.1134/ S0040579520020189
- Lindborg H., Eide V., Unger S., Henriksen S.T., Jakobsen H.A. Parallelization and performance optimization of a dynamic PDE fixed bed reactor model for practical applications. *Computers & Chemical Engineering*, 2004, vol. 28, no. 9, pp. 1585–1597. https://doi. org/10.1016/j.compchemeng.2003.12.009
- Sahinidis N.V., Grossmann I.E. Reformulation of the multiperiod MILP model for capacity expansion of chemical processes. *Operations Research*, 1992, vol. 40, no. 1-supplement-1, pp. 127– 144. https://doi.org/10.1287/opre.40.1.S127
- Royce N.J. Linear programming applied to production planning and operation of a chemical process. *Operational Research Quarterly* (1970–1977), 1970, vol. 21, no. 1, pp. 61–80. https://doi. org/10.2307/3007719
- Biegler L.T. Integrated optimization strategies for dynamic process operations. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2017, vol. 51, no. 6, pp. 910–927. https://doi.org/10.1134/ S004057951706001X
- Dadebo S.A., Mcauley K.B. Dynamic optimization of constrained chemical engineering problems using dynamic programming. *Computers & Chemical Engineering*, 1995, vol. 19, no. 5, pp. 513– 525. https://doi.org/10.1016/0098-1354(94)00086-4
- Pan Y., Fei Z.-S., Zhao L., Liang J. Dynamic optimization for chemical process based on improved iterative dynamic programming algorithm. *Journal of East China University of Science and Technology*, 2013, vol. 39, no. 1, pp. 61–65.
- Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Algorithm of solving a multiobjective optimization problem on the basis of a kinetic chemical reaction model. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2021, vol. 57, no. 6, pp. 668–674. https://doi.org/10.3103/ S8756699021060029
- Santos L.-R., Villas-Bôas F., Oliveira A.R.L., Perin C. Optimized choice of parameters in interior-point methods for linear programming. *Computational Optimization and Applications*, 2019, vol. 73, no. 2, pp. 535–574. https://doi.org/10.1007/s10589-019-00079-9
- Antipina E.V., Antipin A.F. Algorithm for calculating the optimal initial concentrations of chemical reactions substances. *Bulletin of the Technological University*, 2017, vol. 20, no. 13, pp. 84–87. (in Russian)
- Smith S., Mayne D.Q. Exact penalty algorithm for optimal control problems with control and terminal constraints. *International Journal* of Control, 1988, vol. 48, no. 1, pp. 257–271. https://doi. org/10.1080/00207178808906173
- Gugat M., Zuazua E. Exact penalization of terminal constraints for optimal control problems. *Optimal Control Applications and Methods*, 2016, vol. 37, no. 6, pp. 1329–1354. https://doi.org/10.1002/oca.2238
- Gao X., Zhang X., Wang Y. A simple exact penalty function method for optimal control problem with continuous inequality constraints. *Abstract and Applied Analysis*, 2014, vol. 2014, pp. 752854. https:// doi.org/10.1155/2014/752854
- Malisani P., Chaplais F., Petit N. An interior penalty method for optimal control problems with state and input constraints of nonlinear systems. *Optimal Control Applications and Methods*, 2016, vol. 37, no. 1, pp. 3–33. https://doi.org/10.1002/oca.2134
- Pan L.P., Teo K.L. Linear-nonquadratic optimal control problems with terminal inequality constraints. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 1997, vol. 212, no. 1, pp. 176–189. https://doi. org/10.1006/jmaa.1997.5489
- Bushuev A.Yu., Ryauzov S.S. Optimization of solid fuel model gas generator design. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2019, no. 4(24), pp. 3–14. (in Russian). https://doi. org/10.18698/2309-3684-2019-4-314
- Panteleev A.V., Letova T.A. Optimization Methods in the Examples and Problems. Moscow, Vysshaja shkola Publ., 2005, 544 p. (in Russian)
- Fitsov V. Software methodology for estimating the efficiency of the hardware composition of deep packet inspection system using the modernized Hooke-Jeeves method. *Proceedings of Telecommunication Universities*, 2021, vol. 7, no. 1, pp. 132–140. (in Russian). https://doi.org/10.31854/1813-324X-2021-7-1-132-140

тировании гибких производственных систем на основе компьютерного моделирования // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2021. Т. 23. № 2. С. 106–114. https:// doi.org/10.37313/1990-5378-2021-23-2-106-114

- 20. Кожевникова П.В., Кунцев В.Е., Чувашов А.А. Математическая модель расчета источников информации при построении функции принадлежности в задачах оценки достоверности запасов углеводородов // Вестник Астраханского государственного технического университета. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика. 2023. № 1. С. 98–104.
- 21. Новичкова А.В. Численный анализ реакционной способности олефинов и алюминийорганических соединений на основе кинетических моделей частных и общих реакций: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Уфа: БашГУ, 2015. 110 с.

Авторы

Антипина Евгения Викторовна — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, sc 57214879770, https://orcid.org/0000-0002-8458-9638, stepashinaev@ ya.ru

Мустафина Светлана Анатольевна — доктор физико-математических наук, профессор, проректор по развитию филиальной сети, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, вс 6603592002, https://orcid.org/0000-0002-6363-1665, mustafina_sa@mail.ru

Антипин Андрей Федорович — кандидат технических наук, доцент, доцент, Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак, 453103, Российская Федерация, sc 55904921400, https://orcid.org/0000-0002-9151-4167, andrejantipin@ ya.ru

Статья поступила в редакцию 23.08.2023 Одобрена после рецензирования 31.10.2023 Принята к печати 28.11.2023 Sergeev A.I., Krylova S.E., Shamaev S.Yu., Mamukov T.R. Parametric synthesis algorithms in the design of flexible manufacturing systems based on computer modeling. *Izvestia of Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences*, 2021, vol. 23, no. 2, pp. 106–114. (in Russian). https://doi. org/10.37313/1990-5378-2021-23-2-106-114

- Kozhevnikova P.V., Kuntsev V.E., Chuvashov A.A. Mathematical model for calculation of data sources in building membership function in problems of estimating reliable hydrocarbon reserves. *Vestnik of Astrakhan state technical university. Series: Management, computer science and informatics*, 2023, no. 1, pp. 98–104. (in Russian).
- Novichkova A.V. Numerical analysis of olefins and organoaluminum compounds reactivity based on kinetic models of specific and general reactions. Dissertation for the degree of candidate of physical and mathematical sciences. Ufa, BashSU, 2015, 110 p. (in Russian)

Authors

Evgenia V. Antipina — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation, se 57214879770, https://orcid.org/0000-0002-8458-9638, stepashinaev@ya.ru

Svetlana A. Mustafina — D.Sc. (Physics & Mathematics), Vice Rector, Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation, sc 6603592002, https://orcid.org/0000-0002-6363-1665, mustafina_sa@mail.ru

Andrey F. Antipin — PhD, Associate Professor, Sterlitamak branch of Ufa University of Science and Technology, Sterlitamak, 453103, Russian Federation, SE 55904921400, https://orcid.org/0000-0002-9151-4167, andrejantipin@ya.ru

Received 23.08.2023 Approved after reviewing 31.10.2023 Accepted 28.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

NHOOPMAUNOHHIJX TEXHONOFNÄ, MEXAHNKN N ONTUKN

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1136-1142

Raman spectroscopy of nanocomposites ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe obtained by solvothermal-microwave synthesis method

Yolanda Rati¹, Ari Sulistyo Rini²[∞], Ali Umar Akrajas³, Miranti Agustin⁴

- ¹ Institut Teknologi Bandung, Bandung, 40132, Indonesia
- ^{2,4} Universitas Riau, Pekanbaru, 28293, Indonesia

³ Universiti Kebangsaan Malaysia, Selangor, 43600, Malaysia

¹ volandarati@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-0222-6014

² ari.sulistyo@lecturer.unri.ac.id^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-5435-2568

³ akrajas@ukm.edu.my, https://orcid.org/0000-0001-8299-4827

⁴ mirantiagustin17@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-1358-0496

Abstract

We report the ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe nanocomposites synthesized using the solvothermal-microwave method. Raman analysis was thoroughly studied to explain phonon vibration mode in this paper. The strong intensity confirms the high-frequency phonon mode of hexagonal wurtzite ZnO. Also, the presence of Raman intensity of the cubic ZnS and ZnSe structures indicates the longitudinal optical phonon mode. In addition, we find several slight shifts in all ZnO modes for ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe which demonstrate stress and strain in the crystal lattice. We investigate the change in particle size from confocal Raman microscopy. Therefore, the modifications to the material structure and particle size have enhanced its characteristics. Accordingly, the nanocomposite heterostructures by the simple chemical method are attractive materials suitable for optoelectronic devices.

Keywords

heterostructures, phonon vibration mode, Raman, solvothermal-microwave, wurtzite

For citation: Rati Y., Rini A.S., Akrajas A.U., Agustin M. Raman spectroscopy of nanocomposites ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe obtained by solvothermal-microwave synthesis method. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1136–1142. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1136-1142

УДК 544.02

Рамановская спектроскопия нанокомпозитов ZnO/ZnS и ZnO/ZnSe, полученных методом сольвотермического микроволнового синтеза

Иоланда Рати¹, Ари Сулистьо Рини², Али Умар Акраджас³, Миранти Агустин⁴

¹ Бандунгский технологический институт, Бандунг, 40132, Индонезия

^{2,4} Университет Риау, Пеканбару, 28293, Индонезия

³ Национальный университет Малайзии, Селангор, 43600, Малайзия

¹ volandarati@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-0222-6014

² ari.sulistyo@lecturer.unri.ac.id^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-5435-2568

³ akrajas@ukm.edu.my, https://orcid.org/0000-0001-8299-4827

⁴ mirantiagustin17@gmail.com, https://orcid.org/0009-0007-1358-0496

Аннотация

Представлены нанокомпозиты ZnO/ZnS и ZnO/ZnSe, синтезированные сольвотермо-микроволновым методом. Для объяснения режима фононных колебаний применен метод рамановской спектроскопии. Полученная высокая интенсивность рамановского рассеяния подтвердила высокочастотную фононную моду гексагонального вюрцита ZnO. Наличие интенсивного комбинационного рассеяния света кубических структур ZnS и ZnSe свидетельствует о существовании продольной оптической фононной моды. Обнаружены небольшие сдвиги во всех модах ZnO для ZnO/ZnS и ZnO/ZnSe, которые указывают на наличие напряжения и деформации в кристаллической решетке.

© Rati Y., Rini A.S., Akrajas A.U., Agustin M., 2023

Исследованы изменения размера частиц с помощью конфокальной рамановской микроскопии. Показано, что изменения структуры и размеров частиц материала улучшили его характеристики. Подтверждено, что нанокомпозитные гетероструктуры, полученные простым химическим методом, применимы для создания оптоэлектронных устройств.

Ключевые слова

гетероструктуры, фононная мода колебаний, комбинационное рассеяние света, сольвотермо-микроволновый синтез, вюрцит

Ссылка для цитирования: Рати И., Рини А.С., Акраджас А.У., Агустин М. Рамановская спектроскопия нанокомпозитов ZnO/ZnS и ZnO/ZnSe, полученных методом сольвотермического микроволнового синтеза // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1136–1142 (на англ. яз.). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1136-1142

Introduction

Zinc oxide (ZnO) is a widely researched semiconductor material due to its outstanding electronic, optical, and structural features. It recently also gets more attention in several applications, especially in the electronics industry. At room temperature, ZnO in a hexagonal wurtzite structure (for hexagonal structure, lattice parameters *a*, *b*, and *c* are the lengths between two points on the corners of a unit cell: a = b = 0.3296 nm and c = 0.5206 nm) has a wide band gap energy (direct) of 3.37 eV and a large exciton binding energy of 60 meV [1]. ZnO is a versatile material due to its high chemical and thermal durability, enormous surface area, excellent photoelectric, UV-sensitive, and good compatibility [2]. So, it is used for optoelectronic devices such as sensors [3], light-emitting diodes [4], and photocatalysts [5].

Covering ZnO with other semiconductors in the form of core-shell structure can enhance its structural and optical properties. Moreover, it can upgrade ZnO performance for broader applications. Zinc sulfide (ZnS) is a semiconducting material with a broad energy band gap of 3.80 eV in hexagonal wurtzite and 3.68 eV in cubic zinc blende phase [6]. The large absorption spectrum makes it a suitable candidate for sensors and electroluminescence devices [7]. On the other hand, the zinc selenide (ZnSe) semiconductor has a lower band gap energy of 2.86–2.94 eV than the ZnO [8]. ZnSe also has higher conductivity than ZnO and is sensitive in a wide visible spectrum, so it is commonly applied for optoelectronic and photoelectric devices [9].

A nanocomposite is a mixture of two or several materials at a nanometer size scale. Baranowska et al. [10] reported that coating ZnO with ZnS (ZnO/ZnS) nanocomposites has enhanced its environmental stability and improved the electrical properties of ZnO thin films. Khan et al. [11] synthesized ZnO/ZnS hybrid by wet chemical method and found that the composites produced a synergetic effect to decompose dye efficiency in photocatalytic application due to reduced charge recombination and a rise in intrinsic oxygen vacancies. Incorporating the ZnS layer on ZnO/ perovskite also demonstrates rapid electron transfer and reduces the interfacial recombination, hence enhancing the solar cell performance. It also attributed to sulfide which has strong surface interaction with Pb²⁺ resulting in novel electron transport route [12]. Visible light photocatalysis of porous ZnO/ZnSe that was prepared by microwaveassisted hydrothermal method recorded a high activity properties [13]. Kamruzzaman and Zapien [14] reported

that core-shell ZnO/ZnSe nanowires realized highperformance solar cells. It is due to high absorption with a low band gap (1.90 eV) as well as reducing surface defects that marked by decreased Raman intensity of ZnO. All of this performance depends on the optical properties of the material. One of them is studied on interactions in crystal lattice vibrations related to optical vibration modes.

In this paper, we report the solvothermal-microwave synthesis of ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe nanocomposites and investigate their optical and structural characteristic by the Raman spectroscopy analysis. The microwave-solvothermal method has been widely reported as an effective method for semiconducting oxide nanostructures synthesis [15]. This approach has low energy consumption, fast reaction, good quality crystal product, and simple method. We carried out a Raman analysis to study the structural properties of the nanocomposites of ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe synthesized by this route. Raman spectroscopy is one of the most versatile techniques for material characterization. It provides information on the crystal lattice structure and defects that can be known through the optical vibration mode of Raman spectra. We identified the cubic phase of ZnS and ZnSe on the Raman spectrum of ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe. Additionally, a slight shift of the wurtzite ZnO optical mode indicates the stress and strain effects of the crystal lattice, which reveals that structural alteration has occurred due to the coating process.

Materials and methods

Materials

The Flourine Tin Oxide (FTO) substrates (purchased from the Kaivo instrument, China) were used throughout this work. Analytical reagents, including zinc acetate dihydrate (Zn(CH₃COO)₂·2H₂O), zinc nitrate hexahydrate (Zn(NO₃)₂·6H₂O), and hexamethylenetetramine (C₆H₁₂N₄) were purchased from Sigma Aldrich, USA. Other chemicals, such as sodium sulfide (Na₂S), sulfur (S), selenium (Se), sodium borohydride (NaBH₄), and 99 % ethanol (C₂H₅OH) were acquired from R&M Chemicals, Malaysia. Deionized (DI) water originated from the Mili-Q water purification system (approximately 18.2 MΩ).

Synthesis of pristine ZnO

First, 10 mM of $Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$ was diluted in ethanol as seed solution. ZnO seeds are prepared via spin coating seed solution at 3000 rpm and thermal annealing (300 °C) processes on the FTO substrate. Furthermore, pristine ZnO was grown on ZnO seeds by the solvothermal method. 100 mM aqueous solution of $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ and $C_6H_{12}N_4$ (equimolar) was reacted in vial. Then, it was heated at 90 °C for 3 h. The sample obtained was cleaned from residual molecules using DI water.

Route of nanocomposites ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe

The synthesis of ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe nanocomposites ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe were carried out by microwave heating. Pristine ZnO was immersed in growth solution and reacted with 2 ml of Na₂S, NaBH₄ + S, and NaBH₄ + Se (equimolar) in different vials. NaBH₄ acts as a reducing agent to S or Se solution. The three samples were named ZnO/Na₂S, ZnO/NBS, and ZnO/NBSe. Each sample was irradiated at power 360 W for 20 s using a microwave oven. Finally, the nanocomposite samples were rinsed in DI water, flushed with nitrogen, and annealed at 300 °C for 1 h using a tube furnace.

Characterization

Raman spectra were performed at ambient condition using a Confocal Raman Microscopy (CRM 200 WiTec) with charged-coupled device (CCD) camera. An excitation source of 532 nm (Argon ion laser) and power 10 mW were used for recording the spectra. The limit spectral range used was 150–650 cm⁻¹ with a typical resolution of 1.9 cm⁻¹ and was focused into a spot size of about 10 μ m diameter.

Results and discussion

Raman spectrum at room temperature conditions of ZnO nanocomposites in the range of 150–650 cm⁻¹ is shown in Fig. 1. Raman spectroscopy is an effective way to study crystal structure, lattice and defect of films surface by analyzing the phonon frequency of the Raman peak. Raman peaks of pristine ZnO by solvothermal route appear at the frequencies 333, 382, 417–424, 438, and 574 cm⁻¹, which are assigned as $E_2^{\text{High}} - E_2^{\text{Low}}$, $A_1(\text{TO})$, $E_1(\text{TO})$, E_2^{H} , and $E_1(\text{LO})$ modes, respectively. It is a characteristic of the fundamental optical mode (Γ opt) from the Brillouin zone consisting of the longitudinal optic (LO) and transverse optic (TO) of ZnO with C_{6v} (P6₃mc) point group symmetry [16].

The strong peak $E_2^{\rm H}$ (high-frequency phonons) at 438 cm⁻¹ demonstrates the fingerprint of the hexagonal wurtzite structure ZnO with good crystallinity [17]. The vibration of the heavy Zn sublattice and oxygen vibration are linked with this non polar mode [18]. It has a relatively higher intensity compared to others. Raman peak of pristine ZnO is narrow and sharp. ZnO/Na₂S displays a wide and slightly shifted peak (4 cm⁻¹) at 434 cm⁻¹. It is due to the relaxation stress (internal strain) of the intermolecular [19]. Raman peak frequencies of ZnO/NBS and ZnO/NBSe are similar to pristine ZnO. However, the intensity is very low in ZnO/NBSe. It is assumed that the ZnO structure of the nanocomposite ZnO/ZnSe has changed.

The second-order Raman spectrum detected at 333 cm⁻¹ in pristine ZnO is attributed to the phonon boundary zone $E_2^{H}-E_2^{L}$, which is associated with multiphonon scattering nonpolar mode [20]. Frequency shifts in ZnO/Na₂S and ZnO/NBS have occurred at 331 cm⁻¹ and 330 cm⁻¹, respectively. Raman peak of ZnO/NBSe remains constant, although the intensity is barely apparent. The broad hump between 560–610 cm⁻¹ exhibits the lattice vibrations $E_1(LO)$ mode within the pristine ZnO with a peak at 574 cm⁻¹. E_1 (LO) mode refers to the characteristic of randomly ZnO crystallite orientation on the substrate [21]. It occurs due to intrinsic defects, such as oxygen vacancies, interstitial Zn, and the resonance effect in the ZnO crystal lattice at the excitation wavelength [22]. A slight shift occurs at 572 cm⁻¹ and 571 cm⁻¹ for ZnO/Na₂S and ZnO/NBS, respectively. This vibration mode was not found in ZnO/NBSe because of the broadening effect of this peak.

The $E_1(TO)$ mode from pristine ZnO is detected at 417 cm⁻¹ and 424 cm⁻¹. On ZnO nanocomposites, this Raman peak is not clearly seen. A small shift (3 cm⁻¹) occurs in ZnO/NBS at 414 cm⁻¹ and 421 cm⁻¹. Furthermore, the lowest intensity is found at 382 cm⁻¹ which represents $A_1(TO)$ mode. The $A_1(TO)$ mode of ZnO/NBS and ZnO/NBSe shift toward a higher frequency at 385 cm⁻¹ and 393 cm⁻¹. This indicates to compressive stress effect of the crystal lattice of heterostructural materials. Moreover, it is due to interlayer attracting forces being decreased [15]. On the other hand, the Raman peak is not as apparent in the nanocomposite ZnS as well as ZnSe. It is probably due to a change in the structure of the nanocomposite there by weakening the intensity of this mode. E_1 and A_1 are polar of Raman and infrared active because have LO and TO Raman frequency [20].

Additional mode at 343 cm⁻¹ in ZnO/Na₂S and 342 cm⁻¹ in ZnO/NBS using solvothermal-microwave synthesis is related to ZnS indicating $T_2(LO)$ optical mode. It is attributed to the first-order Raman frequency characteristic of zinc blende (β -ZnS cubic) [10]. ZnS has F43m (T_d^2) space group with a high frequency of single LO phonon [23]. TO phonon (277 cm⁻¹) not observed in



Fig. 1. Raman scattering spectrum of ZnO, ZnO/Na₂S, ZnO/NBS, and ZnO/NBSe by solvothermal-microwave synthesis. The wavelength of the excitation source is 532 nm, and the power is 10 mW. The major peak is attributed to $E_2^{\rm H}$ at 438 cm⁻¹ from hexagonal wurtzite ZnO. A slightly shifted of ZnO Raman peaks (blue text) is found for nanocomposite samples. The ZnS (orange graph) and ZnSe (green graph) peaks exhibit at 343 cm⁻¹ and 253 cm⁻¹

the Raman spectrum. The cubic structure revealed the lowtemperature phase, while hexagonal ZnS represented the high-temperature phase. In a solid-liquid chemical process, ZnO and Na₂S were reported to create ZnS cubic with good crystalline properties [24], which is seen from the high peak of Raman frequency. So, the wurtzite structure of ZnO has changed due to the presence of the zinc blende structure of ZnS. On the other hand, ZnO/NBS reveals the low intensity of the Raman peak of ZnS. It is due to NaBH₄ does not optimally reduce sulfur powder. At ambient temperature, sulfur is largely inert to sodium borohydride. To be well reduced and have good dispersion, the molar ratio of NaBH₄ to sulfur is used 15:1 [25]. Overall, the presence of a ZnS confirms that the nanocomposite heterostructure grown on ZnO was successfully synthesized. But, the structure of ZnO/ZnS is still dominated by hexagonal wurtzite because the major peak is found in the E_2^{H} mode of ZnO.

Raman spectra of ZnSe synthesized using the microwave method are revealed at 199, 236, and 253 cm⁻¹. The peak at 253 cm⁻¹ is assigned to the first-order LO phonon mode of zinc blende ZnSe crystal [26]. The appearance of the LO phonon demonstrates a good crystalline structure. An interesting strong peak of ZnSe along with the low intensity of $E_2^{\rm H}$ mode ZnO indicates a transformed structure. A similar condition has been reported by ZnO/ZnSe nanowires [14]. In a neutral solution, the reduction of Se by NaBH₄ provides distinct outcomes compared to S. It is reported that can reduce Se more effectively than sulfur [27]. The TO phonon mode of ZnSe is observed at 199 cm⁻¹. Se effect presence is

associated with a low strain in this mode [9]. Furthermore, SO (surface optic) scattering which appears between LO and TO frequency is assigned at 236 cm⁻¹. It represents the feature of small-size nanostructures [28]. Accordingly, in this work, ZnO/ZnSe heterostructure has been confirmed completely.

Fig. 2 exhibits the surface morphology of ZnO nanocomposites using solvothermal-microwave synthesis at a scale bar of 10 µm using CCD camera integrated with confocal Raman microscopy. The red box on this figure reveals the spot area of the laser source (Ar ion, $\lambda = 532$ nm). Pristine ZnO (Fig. 2, *a*) shows a uniform nanorod shape and is clearly seen. The nanorod size slightly increased in ZnO/Na₂S (Fig. 2, b). Whereas in ZnO/NBS (Fig. 2, c), the diameter nanorods are increasing. Furthermore, the nanorods changed shape and decreased in size in ZnO/NBSe (Fig. 2, d). Also, it appears orange with large red-brown grains. It occurs because of NaBH₄ and Se reacted in water to form a brownish-red solution. While the reduction of NaBH₄ on S produces a white or slightly vellow solution. It is not so obvious in ZnO/NBS image. The surface morphology was more detail observed using field emission scanning electron microscope analysis.

Overall, Raman spectra detected the existence of phonon vibration modes for all samples. The vibrational modes for ZnO, ZnS, and ZnSe observed confirm the formation of ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe nanocomposites by the solvothermal-microwave method. The heterostructures materials from polar semiconductor combination ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe can be potentially applied to the optoelectronic device.



Fig. 2. Images recorded by CCD camera of confocal Raman microscopy in spot size 10 μm of ZnO nanocomposites (the red box is spot laser area using Ar ion with wavelength source at 532 nm). Pristine ZnO shows clustered forms of nanorods (a). Next, ZnO/Na₂S (b) and ZnO/NBS (c) exhibit size gradually increase in the nanorod. In ZnO/NBSe (d), it saw orange small nanorods and brownish-red grains

Conclusion

Synthesis of nanocomposites ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe has been successfully carried out by the solvothermalmicrowave method. Raman analysis demonstrates hexagonal wurtzite ZnO mode from the major peak at 438 cm⁻¹ which identifies the $E_2^{\rm H}$ phonon. Other peaks of ZnO were found at 333, 382, 417–424, and 574 cm⁻¹ attributed $E_2^{\rm H}$ – $E_2^{\rm L}$, A_1 (TO), E_1 (TO), and E_1 (LO) modes. These modes exhibit Raman frequency shifts in the

References

- Raha S., Ahmaruzzaman M. ZnO nanostructured materials and their potential applications: progress, challenges and perspectives. *Nanoscale Advances*, 2022, vol. 8, no. 4, pp. 1868–1925. https://doi. org/10.1039/d1na00880c
- Theerthagiri J., Salla S., Senthil R.A., Nithyadharseni P., Madankumar A., Arunachalam P., Maiyalagan T., Kim H.-S. A review on ZnO nanostructured materials: energy, environmental and biological applications. *Nanotechnology*, 2019, vol. 30, no. 39, pp. 392001. https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab268a
- Park T., Lee K.E., Kim N., Oh Y., Yoo J.-K., Um M.-K. Aspect ratiocontrolled ZnO nanorods for highly sensitive wireless ultraviolet sensor applications. *Journal of Materials Chemistry C*, 2017, vol. 46, no. 5, pp. 12256–12263. https://doi.org/10.1039/C7TC04671E
- Chung D.S., Hall T.D., Cotella G., Lyu Q., Chun P., Aziz H. Significant lifetime enhancement in QLEDs by reducing interfacial charge accumulation via fluorine incorporation in the ZnO electron transport layer. *Nano-Micro Letters*, 2022, vol. 14, no. 1, pp. 212. https://doi.org/10.1007/s40820-022-00970-x
- Kumar M., Patra A. Highly efficient and Reusable ZnO microflower photocatalyst on stainless steel mesh under UV–Vis and natural sunlight. *Optical Materials*, 2020, vol. 107, pp. 110000. https://doi. org/10.1016/j.optmat.2020.110000
- Ali S., Saleem S., Salman M., Khan M. Synthesis, structural and optical properties of ZnS–ZnO nanocomposites. *Materials Chemistry* and *Physics*, 2020, vol. 248, pp. 122900. https://doi.org/10.1016/j. matchemphys.2020.122900
- Fang X., Zhai T., Gautam U.K., Li L., Wu L., Bando Y., Golberg D. ZnS nanostructures: From synthesis to applications. *Progress in Materials Science*, 2011, vol. 56, no. 2, pp. 175–287. https://doi. org/10.1016/j.pmatsci.2010.10.001
- Kim J.S., Kim S.H., Lee H.S. Energy spacing and sub-band modulation of Cu doped ZnSe quantum dots. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, vol. 914, pp. 165372. https://doi.org/10.1016/j. jallcom.2022.165372
- Prabukanthan, P., Rajesh Kumar, T., Harichandran, G. Influence of various complexing agents on structural, morphological, optical and electrical properties of electrochemically deposited ZnSe thin films. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 2017, vol. 28, no. 19, pp. 14728–14737. https://doi.org/10.1007/s10854-017-7341-4
- Baranowska-Korczyc A., Kościński M., Coy E.L., Grześkowiak B.F., Jasiurkowska-Delaporte M. ZnS coating for enhanced environmental stability and improved properties of ZnO thin films. *RSC Advances*, 2018, vol. 8, no. 43, pp. 24411–24421. https://doi.org/10.1039/ c8ra02823k
- Khan A.U., Tahir K., Albalawi K., Khalil M.Y., Almarhoon Z.M., Zaki M.E.A., Latif S., Hassan H.M.A., Refat M.S., Munshi A.M. Synthesis of ZnO and ZnS nanoparticles and their structural, optical, and photocatalytic properties synthesized via the wet chemical method. *Materials Chemistry and Physics*, 2022, vol. 291, pp. 126667. https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2022.126667
- Chen R., Cao J., Duan Y., Hui Y., Chuong T.T., Ou D., Han F., Cheng F., Huang X., Wu B., Zheng N. High-efficiency, hysteresisless, UV-stable perovskite solar cells with cascade ZnO-ZnS electron transport layer. *Journal of the American Chemical Society*, 2019, vol. 141, no. 1, pp. 541–547. https://doi.org/10.1021/jacs.8b11001
- Cho S., Jang J.W., Lee J.S., Lee K.H. Porous ZnO-ZnSe nanocomposites for visible light photocatalysis. *Nanoscale*, 2012, vol. 4, no. 6, pp. 2066–2071. https://doi.org/10.1039/c2nr11869f

ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe nanocomposites. It demonstrates stress and strain in the crystal structure. Moreover, the LO phonon peaks in the zinc blende (cubic phase) of ZnS and ZnSe indicate the existence of heterostructures form. The nanocomposite modifies the particle size of pristine ZnO. So, it means that structural modification of ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe have been effectively synthesized using the solvothermal-microwave route. Therefore, the modified structure has the potential to be suitable for the optoelectronics field, such as solar cells.

Литература

- Raha S., Ahmaruzzaman M. ZnO nanostructured materials and their potential applications: progress, challenges and perspectives // Nanoscale Advances. 2022. V. 8. N 4. P. 1868–1925. https://doi. org/10.1039/d1na00880c
- Theerthagiri J., Salla S., Senthil R.A., Nithyadharseni P., Madankumar A., Arunachalam P., Maiyalagan T., Kim H.-S. A review on ZnO nanostructured materials: energy, environmental and biological applications // Nanotechnology. 2019. V. 30. N 39. P. 392001. https://doi.org/10.1088/1361-6528/ab268a
- Park T., Lee K.E., Kim N., Oh Y., Yoo J.-K., Um M.-K. Aspect ratiocontrolled ZnO nanorods for highly sensitive wireless ultraviolet sensor applications // Journal of Materials Chemistry C. 2017. V. 46. N 5. P. 12256–12263. https://doi.org/10.1039/C7TC04671E
- Chung D.S., Hall T.D., Cotella G., Lyu Q., Chun P., Aziz H. Significant lifetime enhancement in QLEDs by reducing interfacial charge accumulation via fluorine incorporation in the ZnO electron transport layer // Nano-Micro Letters. 2022. V. 14. N 1. P. 212. https:// doi.org/10.1007/s40820-022-00970-x
- Kumar M., Patra A. Highly efficient and Reusable ZnO microflower photocatalyst on stainless steel mesh under UV–Vis and natural sunlight // Optical Materials. 2020. V. 107. P 110000. https://doi. org/10.1016/j.optmat.2020.110000
- Ali S., Saleem S., Salman M., Khan M. Synthesis, structural and optical properties of ZnS–ZnO nanocomposites // Materials Chemistry and Physics. 2020. V. 248. P. 122900, https://doi.org/10.1016/j. matchemphys.2020.122900
- Fang X., Zhai T., Gautam U.K., Li L., Wu L., Bando Y., Golberg D. ZnS nanostructures: From synthesis to applications // Progress in Materials Science. 2011. V. 56. N 2. P. 175–287. https://doi. org/10.1016/j.pmatsci.2010.10.001
- Kim J.S., Kim S.H., Lee H.S. Energy spacing and sub-band modulation of Cu doped ZnSe quantum dots // Journal of Alloys and Compounds. 2022. V. 914. P. 165372. https://doi.org/10.1016/j. jallcom.2022.165372
- D. Prabukanthan P., Rajesh Kumar T., Harichandran G. Influence of various complexing agents on structural, morphological, optical and electrical properties of electrochemically deposited ZnSe thin films // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2017. V. 28. N 19. P. 14728–14737. https://doi.org/10.1007/s10854-017-7341-4
- Baranowska-Korczyc A., Kościński M., Coy E.L., Grześkowiak B.F., Jasiurkowska-Delaporte M. ZnS coating for enhanced environmental stability and improved properties of ZnO thin films // RSC Advances. 2018. V. 8. N 43. P. 24411–24421. https://doi.org/10.1039/ c8ra02823k
- 11. Khan A.U., Tahir K., Albalawi K., Khalil M.Y., Almarhoon Z.M., Zaki M.E.A., Latif S., Hassan H.M.A., Refat M.S., Munshi A.M. Synthesis of ZnO and ZnS nanoparticles and their structural, optical, and photocatalytic properties synthesized via the wet chemical method // Materials Chemistry and Physics. 2022. V. 291. P. 126667. https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2022.126667
- Chen R., Cao J., Duan Y., Hui Y., Chuong T.T., Ou D., Han F., Cheng F., Huang X., Wu B., Zheng N. High-efficiency, hysteresisless, UV-stable perovskite solar cells with cascade ZnO-ZnS electron transport layer // Journal of the American Chemical Society. 2019. V. 141. N 1. P. 541–547. https://doi.org/10.1021/jacs.8b11001
- Cho S., Jang J.W., Lee J.S., Lee K.H. Porous ZnO-ZnSe nanocomposites for visible light photocatalysis // Nanoscale. 2012. V. 4. N 6. P. 2066–2071. https://doi.org/10.1039/c2nr11869f

- Kamruzzaman M., Zapien J.A. Synthesis and characterization of ZnO/ ZnSe NWs/PbS QDs solar cell. *Journal of Nanoparticle Research*, 2017, vol. 19, no. 4, pp. 125. https://doi.org/10.1007/s11051-016-3729-y
- Krithika S., Balavijayalakshmi J. Synthesis of molybdenum disulfide doped zinc oxide nanocomposites by microwave assisted method. *Materials Research Express*, 2019, vol. 6, no. 10, pp. 105023. https:// doi.org/10.1088/2053-1591/ab3828
- Kumar V., Sharma H., Singh S.K., Kumar S., Vij A. Enhanced nearband edge emission in pulsed laser deposited ZnO/c-sapphire nanocrystalline thin films. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 2019, vol. 125, no. 3, pp. 212. https://doi.org/10.1007/ s00339-019-2485-0
- Khan A. Raman spectroscopic study of the ZnO nanostructures. Journal of the Pakistan Materials Society (JPMS), 2010, vol. 4, no. 1, pp. 5–9.
- Ridwan J., Yunas J., Umar A.A., Mohd Raub A.A., Hamzah A.A., Kazmi J., Nandiyanto A.B.D., Pawinanto R.E., Hamidah I. Vertically aligned Cu-doped ZnO nanorods for photocatalytic activity enhancement. *International Journal of Electrochemical Science*, 2022, vol. 17, pp. 220813. https://doi.org/10.20964/2022.08.10
- Abdelouhab Z.A., Djouadi D., Chelouche A., Touam T. Structural, morphological and Raman scattering studies of pure and Ce-doped ZnO nanostructures elaborated by hydrothermal route using nonorganic precursor. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, 2020, vol. 95, no. 1, pp. 136–145. https://doi.org/10.1007/s10971-020-05293-0
- Sharma P., Bhati V.S., Kumar M., Sharma R., Mukhiya R., Awasthi K., Kumar M. Development of ZnO nanostructure film for pH sensing application. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 2020, vol. 126, no. 4, pp. 284. https://doi.org/10.1007/ s00339-020-03466-w
- Bergman L., Chen X.B., Huso J., Morrison J.L., Hoeck H. Raman scattering of polar modes of ZnO crystallites. *Journal of Applied Physics*, 2005, vol. 98, no. 9, pp. 093507. https://doi. org/10.1063/1.2126784
- 22. Abdulrahman A.F., Ahmed S.M., Ahmed N.M., Almessiere M.A. Fabrication, characterization of ZnO nanorods on the flexible substrate (Kapton Tape) via chemical bath deposition for UV photodetector applications. *AIP Conference Proceedings*, 2017, vol. 1875, no. 1, pp. 020004. https://doi.org/10.1063/1.4998358
- Cheng Y.C., Jin C.Q., Gao F., Wu X.L., Zhong W., Li S.H., Chu P.K. Raman scattering study of zinc blende and wurtzite ZnS. *Journal of Applied Physics*, 2009, vol. 106, no. 12, pp. 123505. https://doi. org/10.1063/1.3270401
- 24. Kao C.H., Su W.M., Li C.Y., Weng W.C., Weng C.Y., Cheng C.-C., Lin Y.-S., Lin C.F., Chen H. Fabrication and characterization of ZnS/ ZnO core shell nanostructures on silver wires. *AIP Advances*, 2018, vol. 8, no. 6, pp. 065106. https://doi.org/10.1063/1.5027015
- Meng X., Li L., Li K., Zhou P., Zhang H., Jia J., Sun T. Desulfurization of fuels with sodium borohydride under the catalysis of nickel salt in polyethylene glycol. *Journal of Cleaner Production*, 2018, vol. 176, pp. 391–398. https://doi.org/10.1016/j. jclepro.2017.12.152
- Zhou W., Liu R., Tang D., Zou B. The effect of dopant and optical micro-cavity on the photoluminescence of Mn-doped ZnSe nanobelts. *Nanoscale Research Letters*, 2013, vol. 8, no. 1, pp. 1–10. https://doi. org/10.1186/1556-276X-8-314
- Yang X., Wang Q., Tao Y., Xu H. A modified method to prepare diselenides by the reaction of selenium with sodium borohydride. *Journal of Chemical Research — Part S*, 2002, pp. 160–161. https:// doi.org/10.3184/030823402103171726
- Shan C.X., Liu Z., Zhang X.T., Wong C.C., Hark S.K. Wurtzite ZnSe nanowires: Growth, photoluminescence, and single-wire Raman properties. *Nanotechnology*, 2006, vol. 17, no. 22, pp. 5561–5564. https://doi.org/10.1088/0957-4484/17/22/006

Authors

Yolanda Rati — Master Student, Institut Teknologi Bandung, Bandung, 40132, Indonesia, sc 57221219077, https://orcid.org/0000-0003-0222-6014, yolandarati@gmail.com

Ari Sulistyo Rini — D.Sc., Senior Lecturer, Universitas Riau, Pekanbaru, 28293, Indonesia, sc 36059915000, https://orcid.org/0000-0002-5435-2568, ari.sulistyo@lecturer.unri.ac.id

- Kamruzzaman M., Zapien J.A. Synthesis and characterization of ZnO/ ZnSe NWs/PbS QDs solar cell // Journal of Nanoparticle Research. 2017. V. 19. N 4. P. 125. https://doi.org/10.1007/s11051-016-3729-y
- Krithika S., Balavijayalakshmi J. Synthesis of molybdenum disulfide doped zinc oxide nanocomposites by microwave assisted method // Materials Research Express. 2019. V. 6. N 10. P. 105023. https://doi. org/10.1088/2053-1591/ab3828
- Kumar V., Sharma H., Singh S.K., Kumar S., Vij A. Enhanced nearband edge emission in pulsed laser deposited ZnO/c-sapphire nanocrystalline thin films // Applied Physics A: Materials Science and Processing. 2019. V. 125. N 3. P. 212. https://doi.org/10.1007/s00339-019-2485-0
- Khan A. Raman spectroscopic study of the ZnO nanostructures // Journal of the Pakistan Materials Society (JPMS). 2010. V. 4. N 1. P. 5–9.
- Ridwan J., Yunas J., Umar A.A., Mohd Raub A.A., Hamzah A.A., Kazmi J., Nandiyanto A.B.D., Pawinanto R.E., Hamidah I. Vertically aligned Cu-doped ZnO nanorods for photocatalytic activity enhancement // International Journal of Electrochemical Science. 2022. V. 17. P. 220813. https://doi.org/10.20964/2022.08.10
- Abdelouhab Z.A., Djouadi D., Chelouche A., Touam T. Structural, morphological and Raman scattering studies of pure and Ce-doped ZnO nanostructures elaborated by hydrothermal route using nonorganic precursor // Journal of Sol-Gel Science and Technology. 2020. V. 95. N 1. P. 136–145. https://doi.org/10.1007/s10971-020-05293-0
- Sharma P., Bhati V.S., Kumar M., Sharma R., Mukhiya R., Awasthi K., Kumar M. Development of ZnO nanostructure film for pH sensing application // Applied Physics A: Materials Science and Processing. 2020. V. 126. N 4. P. 284. https://doi.org/10.1007/s00339-020-03466-w
- Bergman L., Chen X.B., Huso J., Morrison J.L., Hoeck H. Raman scattering of polar modes of ZnO crystallites // Journal of Applied Physics. 2005. V. 98. N 9. P. 093507. https://doi. org/10.1063/1.2126784
- Abdulrahman A.F., Ahmed S.M., Ahmed N.M., Almessiere M.A. Fabrication, characterization of ZnO nanorods on the flexible substrate (Kapton Tape) via chemical bath deposition for UV photodetector applications // AIP Conference Proceedings. 2017. V. 1875. N 1. P. 020004. https://doi.org/10.1063/1.4998358
- Cheng Y.C., Jin C.Q., Gao F., Wu X.L., Zhong W., Li S.H., Chu P.K. Raman scattering study of zinc blende and wurtzite ZnS // Journal of Applied Physics. 2009. V. 106. N 12. P. 123505. https://doi. org/10.1063/1.3270401
- Kao C.H., Su W.M., Li C.Y., Weng W.C., Weng C.Y., Cheng C.-C., Lin Y.-S., Lin C.F., Chen H. Fabrication and characterization of ZnS/ ZnO core shell nanostructures on silver wires // AIP Advances. 2018. V. 8. N 6. P. 065106. https://doi.org/10.1063/1.5027015
- Meng X., Li L., Li K., Zhou P., Zhang H., Jia J., Sun T. Desulfurization of fuels with sodium borohydride under the catalysis of nickel salt in polyethylene glycol // Journal of Cleaner Production. 2018. V. 176. P. 391–398. https://doi.org/10.1016/j. jclepro.2017.12.152
- Zhou W., Liu R., Tang D., Zou B. The effect of dopant and optical micro-cavity on the photoluminescence of Mn-doped ZnSe nanobelts // Nanoscale Research Letters. 2013. V. 8. N 1. P. 1–10. https://doi. org/10.1186/1556-276X-8-314
- Yang X., Wang Q., Tao Y., Xu H. A modified method to prepare diselenides by the reaction of selenium with sodium borohydride // Journal of Chemical Research — Part S. 2002. P. 160–161. https:// doi.org/10.3184/030823402103171726
- Shan C.X., Liu Z., Zhang X.T., Wong C.C., Hark S.K. Wurtzite ZnSe nanowires: Growth, photoluminescence, and single-wire Raman properties // Nanotechnology. 2006. V. 17. N 22. P. 5561–5564. https://doi.org/10.1088/0957-4484/17/22/006

Авторы

Рати Иоланда — магистр, Бандунгский технологический институт, Бандунг, 40132, Индонезия, sc 57221219077, https://orcid.org/0000-0003-0222-6014, yolandarati@gmail.com

Рини Ари Сулистьо — доктор наук, преподаватель, Университет Риау, Пеканбару, 28293, Индонезия, 📧 36059915000, https://orcid. org/0000-0002-5435-2568, ari.sulistyo@lecturer.unri.ac.id

Статья поступила в редакцию 02.09.2023

Одобрена после рецензирования 06.11.2023

Ali Umar Akrajas — D.Sc., Senior Lecturer, Universiti Kebangsaan Malaysia, Selangor, 43600, Malaysia, Se 9332520900, https://orcid. org/0000-0001-8299-4827, akrajas@ukm.edu.my

Miranti Agustin — Student, Universitas Riau, Pekanbaru, 28293, Indonesia, SC 57221219077, https://orcid.org/0009-0007-1358-0496, mirantiagustin17@gmail.com Акраджас Али Умар — доктор наук, преподаватель, Национальный университет Малайзии, Селангор, 43600, Малайзия, SC 9332520900, https://orcid.org/0000-0001-8299-4827, akrajas@ukm.edu.my Агустин Миранти — студент, Университет Риау, Пеканбару, 28293, Индонезия, SC 57221219077, https://orcid.org/0009-0007-1358-0496, mirantiagustin17@gmail.com

Received 02.09.2023 Approved after reviewing 06.11.2023 Accepted 27.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

Принята к печати 27.11.2023

Ι/ΪΤΜΟ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ COMPUTER SCIENCE

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1143-1151

Emotion analysis of social network data using cluster based probabilistic neural network with data parallelism

S. Starlin Jini¹, N. Chenthalir Indra²

1,2 S.T Hindu College, Nagercoil, 629002, India

¹ starlinjini@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-8791-7481

² chenthalirindra@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-9121-5386

Abstract

Social media contains a huge amount of data that is used by various organizations to study people's emotions, thoughts and opinions. Users often use emoticons and emojis in addition to words to express their opinions on a topic. Emotion identification from text is no exception, but research in this area is still in its infancy. There are not many emotion annotated corpora available today. The complexity of the annotation task and the resulting inconsistent human comments are a challenge in developing emotion annotated corpora. Numerous studies have been carried out to solve these problems. The proposed methods were unable to perform emotion classification in a simple and cost-effective manner. To solve these problems, an efficient classification of emotions in recordings based on clustering is proposed. A dataset of social media posts is pre-processed to remove unwanted elements and then clustered. Semantic and emotional features are selected to improve classification efficiency. To reduce computation time and increase the efficiency of the system for predicting the probability of emotions, the concept of data parallelism in the classifier is proposed. The proposed model is tested using MATLAB software. The proposed model achieves 92 % accuracy on the annotated dataset and 94 % accuracy on the WASSA-2017 dataset. Performance comparison with other existing methods, such as Parallel K-Nearest Neighboring and Parallel Naive Byes Model methods, is performed. The comparison results showed that the proposed model is most effective in predicting emotions compared to existing models.

Keywords

emotions, clustering, feature extraction, probabilistic neural network and data parallelism

For citation: Starlin Jini S., Chenthalir Indra N. Emotion analysis of social network data using cluster based probabilistic neural network with data parallelism. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1143–1151. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1143-1151

УДК 519.86

Эмоциональный анализ данных социальных сетей с использованием кластерной вероятностной нейронной сети с параллелизмом данных

С. Старлин Джини^{1⊠}, Н. Ченталир Индра²

1,2 Индуистский колледж Южного Траванкора, Нагеркойл, 629002, Индия

¹ starlinjini@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-8791-7481

² chenthalirindra@gmail.com, https://orcid.org/0009-0001-9121-5386

Аннотация

Социальные сети содержат огромное количество данных, которые используются различными организациями для изучения эмоций, мыслей и мнений людей. Пользователи часто используют смайлы и эмодзи в дополнение к словам, чтобы выразить свое мнение по обсуждаемой теме. Идентификация эмоций в тексте также требует изучения, однако исследования в этой области все еще находятся в начальном состоянии. Сегодня доступно недостаточно наборов данных с аннотациями интенсивностей эмоций. Сложность задачи аннотирования эмоций и дальнейшие комментарии пользователей становятся проблемами при разработке новых наборов данных. Для решения этих проблем выполняются многочисленные исследования. Разработанные методы

© Starlin Jini S., Chenthalir Indra N., 2023

не смогли осуществить классификацию эмоций простым и экономичным способом. В настоящей работе представлена модель эффективной классификации эмоций в записях на основе кластеризации. Набор данных записей в социальных сетях предварительно обработан для удаления нежелательных элементов и далее кластеризован. С целью повышения эффективности классификации выбраны семантические и эмоциональные признаки. Для сокращения времени вычислений и повышения эффективности системы прогнозирования вероятности эмоций предложена концепция параллелизма данных в классификаторе. Предложенная модель апробирована с использованием программного обеспечения MATLAB. В результате модель обеспечила точности для аннотированного набора данных — 92 %, а для WASSA-2017 – 94 %. Выполнен анализ производительности описанной модели с существующими методами, такими как Parallel K-Nearest Neighboring и Parallel Naive Byes Model. Результаты сравнения показали, что предложенная модель наиболее эффективно предсказывает эмоции по сравнению с существующими.

Ключевые слова

эмоции, кластеризация, извлечение признаков, вероятностная нейронная сеть и параллелизм данных

Ссылка для цитирования: Старлин Джини С., Ченталир Индра Н. Эмоциональный анализ данных социальных сетей с использованием кластерной вероятностной нейронной сети с параллелизмом данных // Научнотехнический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1143–1151 (на англ. яз.). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1143-1151

Introduction

The growth of big data services and technologies is evaluated in growth in the market, and it is clearly seen that adopters like Yahoo, Facebook and eBay have briefly presented the value of mining complex datasets, as far as companies raised keen to release their value of own data [1]. Emotions like anger, happiness and sadness are states that humans experience and share as status in social media. The developed field of cognitive computing, which mimics and understands the functions of the human brain, has a wide area of research opportunities [2]. Experimenting with this big emotion data results in various challenges [3].

On these mechanisms, the big data process becomes problematic as they involve complex ecosystems. Thus, there is a need for a tool for big data management and infrastructure to deal with the issues for controlling the complicated environment [4]. Certain tools, namely Yarn and Mesos, help to solve the issues, but unfortunately, they were unable to compensate for the issue of cluster performance and optimizing the application. Big data get distributed among clusters for calculations, and parallelization was controlled through policies and its programming average [5]. However, there is a need for optimizing methods for data parallelism applications before the process of execution. The absence of this tool for data management increases network overhead and transaction costs that reduce the effectiveness of data portioning [6]. Hence, enhancing the performance of the data portioning algorithm is much needed. So, filling the gap among the partitioning schemes and volume of datasets, parallel schemes are executed in the clusters [7].

Text mining is a process to extract useful data and learn rate that eliminates noisy and disordered data from datasets [8]. Similarly, insignificant features create noise and they must be eliminated to minimize the size of data for producing improved clustering [9]. As it focuses only on design but fails to address the complexities that are generated in big data volume with complex data, issues are raised in these algorithms [10]. Thus, it resulted in a huge amount of storage of data in a relational database that made the performance of the system complicated. The main intention of this model is to improve the process of clustering big data with the help of the Bayesian clustering method. Optimizing this clustering approach is found to be helpful using a neural network scheme, and in the end, clustering is performed in an efficient way. Contributions of the proposed method are as follows.

- Develop an efficient data parallelism method for classifying emotions in social media comments or posts using neural networks.
- Initially a dataset is collected which have unwanted things like tag, stop word, upper case. The unwanted things are necessary to remove during the preprocessing period. Here six various models are used to pro-process the data, in order to improve the system performance.
- After that the pre-data is a cluster to label the class by the use of Bayesian finite mixture model clustering method. Then the features are extracted from the cluster data to recognize the emotions.
- Making use of the benefits of data parallelism to train the neural network and thus testing it for efficient prediction. Minimization of total time by partially splitting the data into subsets and feeding it to neural networks for training.

Literature Review

Different big data clustering methods for classifying emotions have been presented; their limitation and techniques used have been explained in this section.

Mahmoodabadi et al. [11] have presented an epidemic model analyzed via Particle Swarm Optimization using dataset decomposition strategy. It was developed initially for standard Shepp-Logan phantom image reconstruction. It also had limitations over the limited angle of projections and results shown that this technique was not suitable for the reconstruction of acquired data and suitable only for standard medical imaging applications. Gupta et al. [12] have presented a compression framework called Dynamic Communication Thresholding for communication efficient hybrid training. As it incorporated an action technique to compress gradients, however, it fails to identify the most relevant neurons of the neural network for each training data. Ye et al. [13] have presented a clustering method based on the Bayesian Adversarial network and a low ranked model. It is then adopted to rank the cluster member estimation issue. However, it failed to reduce spectral clustering in the optimization procedure. Experimenting on different datasets showed that it required an optimal clustering unless it was unable to provide sufficient performance. Schneider et al. [14] have presented safe data parallelism for general streaming. However, it failed to ensure tuples as they always exit in parallel regions in similar order that affected the safety conditions.

Alguliyev et al. [15] have presented Semantic Driven Subtractive Clustering Method. In this method, clustering was done based on semantic strength, as opposed to the subtractive clustering method and Fuzzy C-means algorithm. Finally, the process of solving churn issues in big data context gets minimized due to the abundant implementation domain. Kinra et al. [16] have introduced a public policy decision-making algorithm to solve issues that were created by textual big data analysis. However, this algorithm failed to propose solutions for different propensity users having disclosed positive feelings. Bolla et al. [17] have presented a high-order Privacy Cost Optimization algorithm for big data clustering it in the objective function. Designing of this method depends on MapReduce for a very large dataset. However, this scheme failed to support larger actual datasets.

The above related models have some techniques to detect the emotion from the text data. Those models are not provide an effective outcome since they have some limitations like poor cluster performance, long execution time, failure to operate at long dataset, and failed to detect the emotions in various propensity. To overwhelm these limitations, an advanced cluster based machine learning technique is developed. The novel method offers an effective performance in any text data.

Proposed Method for Emotion Recognition in Text Data

In this paper, a method for contribution in the field of classification of emotions is presented. Classification of

emotion is done through a deep learning approach, and also it helps to identify certain emotions expressed in the means of verbal texts obtained from tweets. Two datasets consist of emotional tweets, and their intensity values are allowed for clustering, feature extraction and classification. Clustering was done through the Bayesian method, and feature extraction in terms of semantic and sentimental was done. Finally, the features were used for training Probabilistic Neural Network (PNN) and testing was performed. Testing results are classified as results of emotions obtained at the output layer of the neural network. The overall architecture of the proposed methodology is shown in Fig. 1.

As shown in Fig. 1, obtain social network emotion Datasets from a publicly accessible domain and acquired them for evaluation purposes. Pre-processing stage of eliminating unwanted terms was performed, and the dataset is permitted for clustering in order to obtain the label of data. Bayesian Finite Mixture Model is used to perform clustering, and this clustering was done with the help of Gaussian distribution and hence resulted in a group of clusters. The probability of each cluster is measured, and a label was found according to its probability. The training Phase of multi-layer probabilistic neural network occurs and it was done in parallel form. Learning was done through parallel subsets, and the input vector of each subset (X) is passed to the function of Gaussian for each class, and a group of hidden nodes for all Gaussian functions is computed at hidden nodes. All Gaussian functional values are grouped by each hidden node that is used to feed a single output node from that group and at each class output node. The sum of all inputs is multiplied by constant. The output nodes are determined by the maximum value of all summed functional values (Σ). Parallel execution of classification function was performed, and it is done through a trained Multi-layer Probabilistic Neural Network (MPNN) model. Probabilistic neural network then performs prediction at the testing phase, and at the final layer classification results have been obtained.

Data Pre-Processing

Datasets are obtained and they consist of different emotions and its intensity levels. The pre-sampled dataset



Fig. 1. Overall Architecture of proposed methodology

ſ

is shown in Table 1. As shown in Table 1, two datasets are obtained in parallel for classification and training. These datasets are obtained from the public access social network (e.g., X) dataset domain and used for evaluation purposes. These datasets are necessary to pre-process in order to improve the system performance. Here six various techniques were utilized to pre-process the raw data. There are lower conversion, Hypertext Markup Language or Extensible Markup Language (HTML/XML) tag removal, tokenization, stop word removal, normalization and numerical conversion.

Fig. 2 shows the architecture of data pre-processing. Initially the lower conversion methods are used to convert the upper case tweet words to lower case words. Then the data are passed to HTML/XML tag removal method to remove the tag presented in the dataset. Then the stop words are removed, afterward tokenization is done. Finally the data is normalized to a range, and conversion of the words into numbers for further process is done. That is, the string data conversion into numerical data depends on the unique count of the words. After pre-processing, the data is clustered to provide a label for classification.

BFM model for clustering the pre-data

In this Bayesian approach, probabilities of each class intensity value are analyzed, and its probability is calculated. Computing Probability values that belong to each cluster and Estimation-Maximization is performed with respect to the log-likelihood of each class [18]. Bayesian clustering is used to perform clustering in this proposed method. Let $D = \{x^{(1)}, \dots, x^{(n)}\}$ which denotes numerical conversion dataset where n represents the maximum number of input data. A cluster member number *K* is selected and initialized to perform a hypothesis test. Group labels are initialized to corresponding *n* observations. If K component mixture derives the observation i, Bayesian distribution will be in the form of $p(y_i|\theta_k)$. Each element of $\theta = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k\}$ corresponds to a cluster. Additionally, this mixture has a weight or mixing probability is given as $P_r(c_i = k)$. As far now, the dataset is divided into subsets, and the number of clusters formation is denoted in the form of positive integer n(p). In each cluster, a positive number e_i is given, and a partition of p number of things and device for this data clustering is defined as

$$\pi(y|p) = \prod_{j=1}^{n(p)} m(\{y_i, i \in C_j\}) = \prod_{j=1}^{n(p)} m(yC_j).$$
(1)

In equation (1), $m(yC_j)$ represents the joint distribution of responses for the item in the cluster C_j as it protects an item index and cluster labels that require a function which does not depend on *j* and its exchangeable function, *m* represents von Mises distribution. $y_i = y_1$, y_2 and $y_1 = y$; the role of y_2 is to ensure that the y_i to be spherical vector such that $||y_i||_2 = 1$. Here, the unlabelled datasets are



Fig. 2. Block diagram of data pre-processing

required to perform clustering using covariate information between clusters. On the items, permuting pairs are jointly performed, and it can be given as shown in below

$$m(yC_j) = \int_{u} \prod_{i \in C_j} k(y_i|u_j)G_0 du_j,$$

$$\prod_{i \in C_j} k(y_i|u_j)G_0 du_j = \int_{u} \prod_{i \in C_j} k(y_i|u_j:x_i)G_0 du_j.$$
(2)

In this equation (2), $k(y_i|u_j)$ is density function for y_i with parameters and variables u_j . Distribution function G_0 of u_j at space U. In Bayesian Formulation, an earlier probability that is allocated to each partition p, it gives an equation as shown in below

$$\pi(p|y)\alpha\Phi(p) = \pi(p)\prod_{j=1}^{n(p)} m(yC_j).$$

Where, ' α ' is the Dirichlet prior parameter, $\Phi(p)$ represents parameters of a mixture model. After obtaining these output samples, partition data is essential to be left unaffected by label switching and continued till it reached the total number of clusters *K*. The members of the same cluster are likely to be of two data points when they frequently appear together. A pairwise posterior similarity is given, as shown below:

$$\pi_{ij} = p(c_i = c_j | y) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \{c_i^{(m)} = c_j^{(m)}\}$$

In this equation, M is the number of elements in the cluster, c_i and c_j are cluster assignments of observations y_i and y_j and thus, the true probabilities were left unknown and estimated using this equation. Here $\{c_i^{(m)} = c_j^{(m)}\} = 1$ if $c_i^{(m)} = c_j^{(m)} = 0$ otherwise. The clusters are combined in a step-by-step manner until the entire items are clustered together. The two clusters C_{j1} and C_{j2} are being maximized as shown below:

$$\frac{m(vC_{j1} \cup C_{j2})}{m(vC_{i1})m(vC_{i2})} \times \mu(e_{j1}, e_{j2}),$$

where

$$\mu(e_{j1}, e_{j2}) = \frac{\Gamma(e_{j1} + e_{j2} + \Delta)}{\Gamma(e_{j1} + \Delta)\Gamma(e_{j2} + \Delta)}$$

where Σ is variable which relies each data point, uses one of the mixture component likelihoods and raises the rest to the power zero, I is a parameter that affects the strength of the prior, and the cluster is generated by decentralizing the total sample data and by finding a cluster point.

To implement the spectral clustering method, every sample is generated from label Z. The Bayesian approach for finite mixture model clustering has been done and estimated for a high probability value. With the help of this probability values label for each group of clusters was determined as shown in Table 1.

Feature Extraction

In this proposed method, the feature extraction takes place after performing cluster operations. Both semantic features and sentimental features are extracted from the clustering results. Features are extracted automatically from the cluster data, as textual information is in natural
Samples	Labels
Wrath; umbrage offense; pique temper irritation; Lividity; irascibility short_temper spleen quick_temper	Anger
Unassertiveness; Trepidation; timidity; timidness timorousness; Suspense; stage_fright	Fear
worship adoration; Triumph; softheartedness tenderness; Rejoicing; pride	Нарру
world-weariness Weltschmerz; woe woefulness; Weight; weepiness tearfulness; sorrow	Sad

Table 1. Sample Datasets

language format; a natural language processing technique is applied.

- Semantic Feature Extraction

Semantic features refer to those semantically hidden concepts extracted from tweets. The semantic concepts of entities extracted from tweets can be used to measure the overall correlation of a group of entities. The semantic features are theoretical units which mean holding components that are used to represent the meaning of the word. In proposed model, the semantic features are extracted by providing a count of values in the clustering data, its length and then class it belongs to. It is represented as $(\Delta f_1, \dots, \Delta f_m)$ features. For example, the entities "iPad", "iPod" and "Mac Book Pro" appeared more often in tweets of positive polarity, and they are all mapped to the semantic concept PRODUCT/APPLE. As a result, the tweet from the test set "Finally, I got my iPhone. What a product!" is more likely has a positive polarity because it contains the entity "iPhone" which is also mapped to the concept PRODUCT/APPLE.

— Sentimental Feature Extraction

Sentimental features like Happy, Sorrow, Anger and Fear are extracted in various methods. By applying dictionary methods, synonyms and antonyms are found. To extract the sentimental features efficiently, Term Frequency-Inverse Document Frequency is used. The importance of a data in a cluster is measured, and its frequency determines the feature ratio. Term Frequency is computed by finding a fraction value between the number of times a data appears in the clustering and the total number of data. Likewise, Inverse Document Frequency is measured by measuring the number of input data with the same feature and its redundancy. It is a fraction between the total number of data and the total number of redundant data *t*, it is represented as $(\Delta f_m, ..., \Delta f_n)$.

Parallelism based Multi-Layer-Probabilistic Neural Network for emotion recognition

After extracting the features, the dataset was split into two groups such as training (80 %) and testing (20 %). Only the trained datasets are sent to train the model of MPNN. MPNN models are mostly used for classification types. A basic structure of MPNN is enhanced to multilayer and utilized for classification, as explained in the next section. Fig. 3 shows the MPNN architecture. Probabilistic neural network is represented by a parallel algorithm designed based on Probability density function estimation and Bayes classification rule, and as it is feed forward, a neural network developed from radial basis function network. It consists of four layers: pattern layer, input layer, an output layer and summation layer [19].

Extracted features are given as input to the input layer, PNN computes variations between sample input

Eigenvector, i.e., input data and predicted Eigenvector that is classifier output. In here, the sample was considered as feature extracted data which was an matrix format, and the Eigenvector was considered as the s-variable of matrix. In the final layer, the classification of samples was computed to predict the output.

— Input Layer

Input Layer is comprised of two groups of nodes that consist of semantic features and sentimental features. The feature vector is carried out by the input layer and delivers to the pattern layer. Input \tilde{X} is made for the process of drilling the variables.

$$\tilde{X} = [x^T, b^T, v^T, a^T]^T,$$

where, x, b, v and a are input feature of both semantic and sentimental features. The input layer receives Eigenvector from samples and transfers the data to the pattern layer. In the input layer, the number of neurons presented is equal to Eigenvectors samples.

— Pattern Layer

The second layer is the pattern layer, having *N* neurons, here the number of training data is assumed as N_i of the *i*th class, it takes a pattern *z* from the input layer and assigns it to one of the *k* classes. All smoothing parameters are almost similar to $\sigma_1 = \sigma_2 = ... = \sigma_d$ as well as the weight factor is estimated utilizing the bell-shaped Gaussian function.

$$\varphi_j^{i}(z) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \times \exp\left[-\frac{(z-x_j^{i})^T(z-x_j^{i})}{2\sigma^2}\right]$$

In the formula above, $(z - x_j^i)$ denoted as a function of φ_j^i , which indicates the prospect of *z* pattern which is equal to x_j^i and *j*th data training is represented as x_j^i in the *j*th training vector belonging to the *i*th class. The smoothing parameter σ describes the spread of the Gaussian function and it can take a value among 0 and 1.



Fig. 3. MPNN architecture

— Summation Layer

The third layer is the summation layer containing k neurons which calculate the maximum likelihood of pattern z belonging to the *i*th class, as given below.

$$P_i(z) = \frac{1}{N_i} \sum_{i=1}^{N_i} \varphi_j^i(z)$$

where *N* is the dimension of the input vectors, φ is output of pattern layer and *z* is input layer pattern.

— Output Layer

The final layer is the decision layer that assigns to z class with maximum likelihood as follows.

$$C(z) = \underset{i}{\operatorname{argmax}} \{P_i(z)\}, i = 1, 2, ..., k,$$

where C(z) is the class that belongs to *z*. Thus the feature vectors in each class may be reduced by thinning those that are too close to another one and making *f* larger. The training set is made up of given exemplar feature vectors. For each one, it is known the class to which it belongs.

Result and discussion

This section describes the evaluation of dataset details and compares it to previous techniques, namely Parallel K-Nearest Neighbouring techniques (PKNN) and Parallel Naïve Byes Model (PNBM). These methods are evaluated in MATLAB platform and implemented in Intel(R) Core (TM) i5-3570S CPU@ 3.10 GHz and memory 8 GB with a 64-bit operating system and 64 based processor.

Dataset description

Text can be annotated for emotions (such as happiness, fear, or surprise) or polarity orientation (positive/negative)¹. While certain words have emotional significance in relation to a specific story, the affective potency of many others is a product of our collective imagination (e.g. words such as "mum", "ghost", "war"). Categorise the titles using the relevant emotion label and a valence indicator given, a set of predefined emotion labels (such as pleasure, fear, and surprise). WASSA-2017 Shared Task on Emotion Intensity is described in². There are databases for four emotions: happiness, sorrow, fear, and rage. A real-valued score between 0 and 1 reflecting the level of anger felt by the speaker is included in the anger training dataset, for instance, along with tweets.

Further the proposed model performance is compared to some other existing models like PKNN and PNBM. The PKNN is one of the developed algorithms for classification. It can naturally handle multi-class cases and can be used for both classification and regression problems. The parallel implementation speeds up the algorithm to minimize the computational time. Similarly, PNBM is also another developed method for minimizing the computational time. It is known to scale linearly with the number of predictors

Table 2. Simulation parameter of proposed and exisiting models

Methods	Parameter	Ranges
PNBM	var_smoothing	0.00012
PKNN	n_neighbors	3
	Standardize	1
MPNN	No. of hidden layers	4
	Training algorithm	Radial bias
	Scaling	Normalization

and rows, also it handles categorization difficulties. For this reason, PKNN and PNBM are chosen for comparing the proposed model performance. Table 2 shows the Simulation parameter of proposed and existing model.

In Fig. 4, the confusion matrix of proposed model is demonstrated. It is based on True positive, False positive, True negative, False negative. Using those values, we made a comparison for evaluation matrices, such as Sensitivity, Specificity, Accuracy, F-measure, Recall and Error analysis.

Accuracy values are determined and compared to the previous methods and presented in Table 3. From the table, it is understandable that the proposed MPNN classifier performs better than other previous classification techniques. MPNN model reached an accuracy level of 92.3 % value, and the PKNN model gives an accuracy value of 87 %, and the PNBM have accuracy value of 89 %. In contrast to accuracy measurement, error analysis also plays a vital role to show that a model is more effective. Then error values are analyzed for proposed as well as previous methods. From Table 3, it is visible that MPNN exhibits less error value in a range of 7.7 % and PKNN method exhibits 13 % of error values, and PNBM exhibits 11 % of error values.

By measuring Precision and recall values, the F-measure was then calculated. F-measure value evaluated from the proposed model is 90 %, PKNN is 82 %, and PNBM is 80 % of the measured value. Similarly, the recall measurement values of the proposed, as well as previous





Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

¹ Dataset 1: SemEval2007 affective text dataset. Available at: http://web.eecs.umich.edu/~mihalcea/affectivetext/ (accessed: 03.02.2023).

² Dataset 2: WASSA'17 Shared Task on Emotion intensity dataset: Available at: https://saifmohammad.com/WebPages/TweetEmotionIntensity-dataviz.html (accessed: 06.02.2023).

Metrics	MPNN	PKNN	PNBM
Accuracy	Accuracy 92.3		89
Error	7.7	13	11
F-measure	90	82	80
Recall	90	82	80
Sensitivity	89	75	70
Specificity	90	80	85

Table 3. Performance metrics comparison, %

models MPNN classifier, exhibits 90 % of recall values, PKNN gives 82 % of recall, and PNBM gives 80 % of the value. Then evaluating the results of sensitivity analysis of the proposed and existing methods is made. The proposed method MPNN classifier shows 89 % of sensitivity value and the PKNN model gives 75 % of sensitivity value. PNBM classifier exhibits 70 % of sensitivity value. Thus overall performance on sensitivity gets improved in the MPNN model. It is visible that the MPNN model gives 90 % of the specificity value, PKNN exhibits 80 % and PNBM about 85 % of the specificity value. Thus, from sensitivity and specificity analysis it has been clearly visible that the proposed model outperforms previous classification methods.

Evaluation Results of MPNN classifier

The proposed model is evaluated with respect to two datasets for parallel execution, and their comparison of results is presented here, as shown in Table 4.

From Fig. 5, it is quite desirable to say that the proposed model performs optimally during parallel execution time, and these techniques result in changes with respect to increase in data size. For 20 kB it results in 5 s and for 40 kB it exhibits 6 s of execution time. Comparatively, as without parallelization, a data size of 100 kB results in 42.5 s of execution time, but with parallelism, it minimizes up to 35 s. Thus, the proposed Bayesian clustering-based classification approach results better while executing parallel.

Table 5 shows the computational comparison of proposed and existing models after using parallelization. The proposed PNN take 42.5 s to complete the process for 100 kB, whereas the existing techniques like PKNN

Table 4. Evaluation Results for Dataset 1 and 2, %

Evaluation Metrics	Data	set 1	Dataset 2			
	With Parallelism	Without Parallelism	With Parallelism	Without Parallelism		
Accuracy	92.08	88.14	94.53	90.91		
Error	7.82	11.90	5.52	9.20		
F-measure	90.33	87.21	91.07	80.83		
Recall	91.90	85.09	92.07	79.83		



Fig. 5. Execution time comparison results for without parallelization and with parallelization

Table 5. Execution time comparison for 100 kB data size

Methods	Time, s
Proposed PNN	42.5
PKNN	47.9
PNBM	54.5

and PNBM consumed 47.9 s and 54.5 s respectively to complete 100 kB. The comparison proves the proposed model offers a better outcome as compared to other methods.

Conclusion

In this paper, a novel cluster based supervised learning model is developed to predict the emotions from the tweet data. By reducing the complexity of annotation task, a parallelism based PNN model is developed to predict the suitable emotion. Two various datasets are used for analysis of the system performance individually such as annotated dataset and WASSA-2017 dataset. The dataset contain unwanted symbols or signs that are removed from preprocessing. Then the pre-data are clustered to provide a label through the use of Bayesian Finite mixture. Then the semantic and sentimental features are extracted from the cluster data to improve the system performance. These features are fed to the classifier to predict the emotions. A novel data parallelism is used in the classifier to reduce the computation time of the system. The proposed model provides 92 % and 94 % accuracy for annotated dataset and WASSA-2017 dataset, respectively, and the results are compared with previous techniques like PKNN and PNBM. It has even been evaluated that the proposed Bayesian Clustering-based MPNN classifier over-performs other models.

References

- Lee N., Ajanthan T., Torr P.H., Jaggi M. Understanding the effects of data parallelism and sparsity on neural network training. *arXiv*, 2021, arXiv:2003.11316. https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.11316
- Xun Y., Zhang J., Qin X., Zhao X. FiDoop-DP: Data partitioning in frequent itemset mining on hadoop clusters. *IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems*, 2017, vol. 28, no. 1, pp. 101–114. https://doi.org/10.1109/tpds.2016.2560176
- Kulkarni M., Pingali K., Ramanarayanan G., Walter B., Bala K., Chew L.P. Optimistic parallelism benefits from data partitioning. *ACM SIGPLAN Notices*, 2008, vol. 43, no. 3, pp. 233–243. https:// doi.org/10.1145/1353536.1346311
- Hernández Á.B., Perez M.S., Gupta S., Muntés-Mulero V. Using machine learning to optimize parallelism in big data applications. *Future Generation Computer Systems*, 2018, vol. 86, pp. 1076–1092. https://doi.org/10.1016/j.future.2017.07.003
- Karthick S. Semi supervised hierarchy forest clustering and KNN based metric learning technique for machine learning system. *Journal* of Advanced Research in Dynamical and Control Systems, 2017, vol. 9, pp. 2679–2690.
- Chatterjee A., Gupta U., Chinnakotla M.K., Srikanth R., Galley M., Agrawal P. Understanding emotions in text using deep learning and big data. *Computers in Human Behavior*, 2019, vol. 93, pp. 309–317. https://doi.org/10.1016/j.chb.2018.12.029
- Marimuthu M., Rajalakshmi M., Phil M.C.A.M. A big data clustering algorithm for sentiment analysis to search the crucial statistics for decision making. *International Journal for Research and Development in Technology (IJRDT)*, 2017, vol. 7, no. 2, pp. 132– 138.
- Feng N., Xu S., Liang Y., Liu K. A probabilistic process neural network and its application in ECG classification. *IEEE Access*, 2019, vol. 7, pp. 50431–50439. https://doi.org/10.1109/access.2019.2910880
- He Q., Zhuang F., Li J., Shi Z. Parallel implementation of classification algorithms based on MapReduce. *Lecture Notes in Computer Science*, 2010, vol. 6401, pp. 655–662. https://doi. org/10.1007/978-3-642-16248-0_89
- Tang D., Wei F., Yang N., Zhou M., Liu T., Qin B. Learning sentiment-specific word embedding for twitter sentiment classification. Proc. of the 52nd Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (Volume 1: Long Papers), 2014, pp. 1555– 1565. https://doi.org/10.3115/v1/p14-1146
- Mahmoodabadi M.J. Epidemic model analyzed via particle swarm optimization based homotopy perturbation method. *Informatics in Medicine Unlocked*, 2020, vol. 18, pp. 100293. https://doi. org/10.1016/j.imu.2020.100293
- Gupta V., Choudhary D., Tang P.T.P., Wei X., Wang X., Huang Y., Kejariwal A., Ramchandran K., Mahoney M.W. Training recommender systems at scale: Communication-efficient model and data parallelism. arXiv, 2020, arXiv:2010.08899. https://doi. org/10.48550/arXiv.2010.08899
- Ye X., Zhao J., Chen Y., Guo L.J. Bayesian adversarial spectral clustering with unknown cluster number. *IEEE Transactions on Image Processing*, 2020, vol. 29, pp. 8506–8518. https://doi.org/10.1109/ tip.2020.3016491
- Schneider S., Hirzel M., Gedik B., Wu K.L. Safe data parallelism for general streaming. *IEEE Transactions on Computers*, 2015, vol. 64, no. 2, pp. 504–517. https://doi.org/10.1109/tc.2013.221
- Alguliyev R.M., Aliguliyev R.M., Sukhostat L.V. Efficient algorithm for big data clustering on single machine. *CAAI Transactions on Intelligence Technology*, 2020, vol. 5, no. 1, pp. 9–14. https://doi. org/10.1049/trit.2019.0048
- Kinra A., Beheshti-Kashi S., Buch R., Nielsen T.A.S., Pereira F. Examining the potential of textual big data analytics for public policy decision-making: A case study with driverless cars in Denmark. *Transport Policy*, 2020, vol. 98, pp. 68–78. https://doi.org/10.1016/j. tranpol.2020.05.026
- Bolla S., Anandan R. Privacy preservation of data using efficient group cost optimization method with big data clustering. *International Journal of Advanced Research in Engineering and Technology* (*IJARET*), 2020, vol. 11, no. 11, pp. 748–760. https://doi. org/10.34218/IJARET.11.11.2020.071
- Fan W., Bouguila N. Spherical data clustering and feature selection through nonparametric Bayesian mixture models with von Mises distributions. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2020, vol. 94, pp. 103781. https://doi.org/10.1016/j. engappai.2020.103781

Литература

- Lee N., Ajanthan T., Torr P.H., Jaggi M. Understanding the effects of data parallelism and sparsity on neural network training // arXiv. 2021. arXiv:2003.11316. https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.11316
- Xun Y., Zhang J., Qin X., Zhao X. FiDoop-DP: Data partitioning in frequent itemset mining on hadoop clusters // IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems. 2017. V. 28. N 1. P. 101–114. https://doi.org/10.1109/tpds.2016.2560176
- Kulkarni M., Pingali K., Ramanarayanan G., Walter B., Bala K., Chew L.P. Optimistic parallelism benefits from data partitioning // ACM SIGPLAN Notices. 2008. V. 43. N 3. P. 233–243. https://doi. org/10.1145/1353536.1346311
- Hernández Á.B., Perez M.S., Gupta S., Muntés-Mulero V. Using machine learning to optimize parallelism in big data applications // Future Generation Computer Systems. 2018. V. 86. P. 1076–1092. https://doi.org/10.1016/j.future.2017.07.003
- Karthick S. Semi supervised hierarchy forest clustering and KNN based metric learning technique for machine learning system // Journal of Advanced Research in Dynamical and Control Systems. 2017. V. 9. P. 2679–2690.
- Chatterjee A., Gupta U., Chinnakotla M.K., Srikanth R., Galley M., Agrawal P. Understanding emotions in text using deep learning and big data // Computers in Human Behavior. 2019. V. 93. P. 309–317. https://doi.org/10.1016/j.chb.2018.12.029
- Marimuthu M., Rajalakshmi M., Phil M.C.A.M. A big data clustering algorithm for sentiment analysis to search the crucial statistics for decision making // International Journal for Research and Development in Technology (IJRDT). 2017. V. 7. N 2. P. 132–138.
- Feng N., Xu S., Liang Y., Liu K. A probabilistic process neural network and its application in ECG classification // IEEE Access. 2019. V. 7. P. 50431–50439. https://doi.org/10.1109/ access.2019.2910880
- He Q., Zhuang F., Li J., Shi Z. Parallel implementation of classification algorithms based on MapReduce // Lecture Notes in Computer Science. 2010. V. 6401. P. 655–662. https://doi. org/10.1007/978-3-642-16248-0 89
- Tang D., Wei F., Yang N., Zhou M., Liu T., Qin B. Learning sentiment-specific word embedding for twitter sentiment classification // Proc. of the 52nd Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (Volume 1: Long Papers). 2014. P. 1555– 1565. https://doi.org/10.3115/v1/p14-1146
- Mahmoodabadi M.J. Epidemic model analyzed via particle swarm optimization based homotopy perturbation method // Informatics in Medicine Unlocked. 2020. V. 18. P. 100293. https://doi.org/10.1016/j. imu.2020.100293
- Gupta V., Choudhary D., Tang P.T.P., Wei X., Wang X., Huang Y., Kejariwal A., Ramchandran K., Mahoney M.W. Training recommender systems at scale: Communication-efficient model and data parallelism // arXiv. 2020. arXiv:2010.08899. https://doi. org/10.48550/arXiv.2010.08899
- Ye X., Zhao J., Chen Y., Guo L.J. Bayesian adversarial spectral clustering with unknown cluster number // IEEE Transactions on Image Processing. 2020. V. 29. P. 8506–8518. https://doi.org/10.1109/ tip.2020.3016491
- Schneider S., Hirzel M., Gedik B., Wu K.L. Safe data parallelism for general streaming // IEEE Transactions on Computers. 2015. V. 64. N 2. P. 504–517. https://doi.org/10.1109/tc.2013.221
- Alguliyev R.M., Aliguliyev R.M., Sukhostat L.V. Efficient algorithm for big data clustering on single machine // CAAI Transactions on Intelligence Technology. 2020. V. 5. N 1. P. 9–14. https://doi. org/10.1049/trit.2019.0048
- Kinra A., Beheshti-Kashi S., Buch R., Nielsen T.A.S., Pereira F. Examining the potential of textual big data analytics for public policy decision-making: A case study with driverless cars in Denmark // Transport Policy. 2020. V. 98. P. 68–78. https://doi.org/10.1016/j. tranpol.2020.05.026
- Bolla S., Anandan R. Privacy preservation of data using efficient group cost optimization method with big data clustering // International Journal of Advanced Research in Engineering and Technology (IJARET). 2020. V. 11. N 11. P. 748–760. https://doi. org/10.34218/IJARET.11.11.2020.071
- Fan W., Bouguila N. Spherical data clustering and feature selection through nonparametric Bayesian mixture models with von Mises distributions // Engineering Applications of Artificial Intelligence. 2020. V. 94. P. 103781. https://doi.org/10.1016/j. engappai.2020.103781

 Alotaibi N., Al-onazi B.B., Nour M.K., Mohamed A., Motwakel A., Mohammed G.P., Yaseen I., Rizwanullah M. Political optimizer with probabilistic neural network-based Arabic comparative opinion mining. *Intelligent Automation & Soft Computing*, 2023, vol. 36, no. 3, pp. 3121–3137. https://doi.org/10.32604/iasc.2023.033915

Authors

S. Starlin Jini — Researcher, S.T Hindu College, Nagercoil, 629002, India, sc 57214932690, https://orcid.org/0000-0002-8791-7481, starlinjini@gmail.com

N. Chenthalir Indra — Supervisor, Assistant Professor, S.T Hindu College, Nagercoil, 629002, India, 📧 55803553600, https://orcid. org/0009-0001-9121-5386, chenthalirindra@gmail.com

Received 07.07.2023 Approved after reviewing 27.10.2023 Accepted 23.11.2023 Alotaibi N., Al-onazi B.B., Nour M.K., Mohamed A., Motwakel A., Mohammed G.P., Yaseen I., Rizwanullah M. Political optimizer with probabilistic neural network-based Arabic comparative opinion mining // Intelligent Automation & Soft Computing. 2023. V. 36. N 3. P. 3121–3137. https://doi.org/10.32604/iasc.2023.033915

Авторы

Старлин Джини С. — исследователь, Индуистский колледж Южного Траванкора, Нагеркойл, 629002, Индия, вс 57214932690, https://orcid. org/0000-0002-8791-7481, starlinjini@gmail.com

Ченталир Индра Н. — руководитель, доцент, Индуистский колледж Южного Траванкора, Нагеркойл, 629002, Индия, № 55803553600, https://orcid.org/0009-0001-9121-5386, chenthalirindra@gmail.com

Статья поступила в редакцию 07.07.2023 Одобрена после рецензирования 27.10.2023 Принята к печати 23.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

NHOOPMAUNOHHIJX TEXHONOFNÄ, MEXAHNKN N ONTUKN

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1152-1161 УДК 004.932

Оценка возможности применения метода декомпозиции изображений по топологическим признакам для уменьшения энтропии при их сжатии

Артём Владимирович Абакумов¹, Сергей Владимирович Еремеев²

^{1,2} Муромский институт (филиал) ФГБОУ ВО «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых», Муром, 602264, Российская Федерация ¹ artem210966@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-5784-7147

² sv-eremeev@yandex.ru^{\[\]}, https://orcid.org/0000-0001-8482-1479

Аннотация

Введение. Стремительное увеличение объема визуальной информации в сети Интернет стимулирует усовершенствование существующих и поиск новых подходов для решения задачи сжатия изображений. Одной из важных характеристик при обработке изображений, в частности при их сжатия, является энтропия. В работе исследована возможность применения метода декомпозиции изображения по топологическим признакам для уменьшения энтропии с целью дальнейшего сжатия изображения при сохранении высокого качества. Метод. Топологическая декомпозиция предполагает разложение изображения на компоненты, каждая из которых отражает отдельный элемент на изображении. Топологическая декомпозиция позволяет сгруппировать глобальные структуры и их детали в отдельные матрицы специальные типа. Для уменьшения энтропии предложено удаление детализирующих составляющих и восстановление изображения. Отличительная особенность представленного подхода состоит в искажении не всего изображения, а части его области. Основные результаты. Предложенный метод апробирован на практической задаче сжатия изображений алгоритмом RLE, зависимым от энтропии. Полученные результаты показали, что применение топологического разложения обоснованно в вопросах уменьшения энтропии, что позволяет использовать предобработанное изображение для сжатия. Для оценки качества изображений использованы индексы PSNR, SSIM, MSE, NRM. Показано, что в сравнении с вейвлет-преобразованием при сопоставимой степени сжатия изображений предлагаемый подход конкурентноспособный по показателям оценки качества, а для определенного класса изображений со слабо зашумленными длинными объектами превосходит его. Обсуждение. Полученные результаты открывают возможности для дальнейшего изучения топологической декомпозиции для сжатия изображений с потенциально большей эффективностью и при меньших искажениях.

Ключевые слова

декомпозиция изображений, топологический анализ, энтропия, сжатие с потерями, оценка качества изображений

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта № 23-21-10064.

Ссылка для цитирования: Абакумов А.В., Еремеев С.В. Оценка возможности применения метода декомпозиции изображений по топологическим признакам для уменьшения энтропии при их сжатии // Научнотехнический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1152–1161. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1152-1161

[©] Абакумов А.В., Еремеев С.В., 2023

Assessing the possibility of using the method of image decomposition based on topological features to reduce entropy during their compression

Artyom V. Abakumov¹, Sergey V. Eremeev²

1,2 Murom Institute (Branch) of Vladimir State University, Murom, 602264, Russian Federation

¹ artem210966@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-5784-7147

² sv-eremeev@yandex.ru^{\overline}, https://orcid.org/0000-0001-8482-1479

Abstract

The rapid increase in the volume of visual information on the internet stimulates the improvement and search for new approaches to solving the problem of image compression. One of the important characteristics in the field of image processing, in particular in matters of compression, is entropy. The work explores the possibility of using the method of image decomposition based on topological features to reduce entropy in order to further compress the image while maintaining high quality. Topological decomposition involves decomposing an image into components each of which reflects a separate element in the image. Topological decomposition allows us to group global structures and their details into separate matrices of special types. To reduce entropy, it is proposed to remove some detail components and restore the image. A distinctive feature of the proposed approach is that it does not distort the entire image, but only some areas. The proposed method is tested in a practical compression problem using the entropy-dependent RLE algorithm. The results showed that topological decomposition is good at reducing entropy, which will allow us to use the preprocessed image for compression. PSNR, SSIM, MSE, NRM indices are used to assess image quality. When compared with the wavelet transform, the proposed approach is competitive in terms of image quality assessment at a comparable compression ratio, and exceeds it for a certain class of images with slightly noisy long objects. The results open up opportunities for further study of topological decomposition in image compression with potentially greater efficiency and less distortion.

Keywords

image decomposition, topological analysis, entropy, lossy compression, image quality assessment

Acknowledgements

This study was supported by the Russian Science Foundation, project no. 23-21-10064.

For citation: Abakumov A.V., Eremeev S.V. Assessing the possibility of using the method of image decomposition based on topological features to reduce entropy during their compression. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1152–1161 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1152-1161

Введение

По информации исследовательской компании Statista Research Department, объем интернета к 2025 году составит больше 180 зеттабайт¹. Можно с уверенностью утверждать, что большую часть занимает аудиовизуальная информация, для хранения которой требуются эффективные методы сжатия. Данный факт стимулирует к созданию и внедрению новых подходов в этой области.

Разные данные имеют разную степень сжатия. Чем информация сложнее, тем она хуже сжимается. В случае сжатия изображений фактор сложности определяет информационная энтропия.

Стоит заметить, что многие современные методы сжатия изображений, основанные на классических подходах, подошли к некоторому пределу и, скорее, борются за скорость, чем за эффективность. Это можно увидеть на примере алгоритма Quite OK Image. В случае с видеофайлами ситуация схожая, о чем говорит популярность кодека кодирования H.265/HEVC [1].

Кроме того, современные тенденции двигаются от четко сформулированных алгоритмов к использованию нейронных сетей. В работе [2] машинное обучение исследовано с точки зрения сжатия изображений. Однако результат является сложно прогнозируемым и слабо контролируемым, что может помешать повсеместному использованию таких методов.

Отдельно выделим класс топологического сжатия. Его особенность в том, что сжатие происходит контролируемо. Это выражается в возможности убрать одну область, не трогая другие. Так, в работе [3] показано сжатие поверхности, и при этом остаются нетронутыми определенные важные топологические регионы. К данному классу относится предложенный в настоящей работе подход.

Одним из популярных направлений для сжатия изображений является декомпозиция. Декомпозиция изображения представляет собой разложение исходного двумерного сигнала на отдельные структуры с возможностью обратного восстановления. Подходы к декомпозиции отличаются в зависимости от поставленной задачи. В отдельную группу входят методы, которые базируются на спектральном анализе, раскладывая изображение на низкие и высокие частоты. Яркие представители данного подхода — методы на основе вейвлет-преобразования [4-7]. Также существуют методы, которые раскладывают изображение на структуры и текстуры [8], используют иерархические преобразования сигнала [9]. Очень часто декомпозиция связана с деревом квадрантов [10, 11]. Широко используется анализ последовательности изображений с течением времени. В [12] показан метод разложения, который обрабатывает одну и ту же сцену при меняющемся освещении, а в [13] для анализа последовательностей применена декомпозиция на основе Фурьепреобразования.

¹ [Электронный pecypc]. https://www.statista.com/ statistics/871513/worldwide-data-created/ (дата обращения: 28.10.2023).

Декомпозиция при разных подходах позволяет выделить наименее значимые коэффициенты разложения или области, обработка которых приведет к уменьшению энтропии изображения. Данный результат может повлиять на коэффициент сжатия при использовании энтропийных методов кодирования. Однако это также влияет и на качество изображений. Таким образом, важная задача декомпозиции — сохранение высокого качества изображений при высокой степени сжатия с потерями. Для оценки качества существуют специальные критерии, которые позволяют численно сравнить исходное и результирующее изображения.

В работе [14] авторами разработан метод топологической декомпозиции изображений. В его концепции лежит разделение исходного изображения на матрицы специального типа, которые содержат глобальные структуры изображения, а также детальные элементы.

Цель настоящей работы заключается в исследовании влияния топологической декомпозиции на качество изображения после отбрасывания малозначащих детальных структур. Исследован вопрос оценки качества изображений предлагаемого подхода и вейвлет-преобразования при сопоставимой степени сжатия.

Декомпозиция изображений

Топологическая декомпозиция. Теоретические основы метода декомпозиции изображений по топологическим признакам представлены в работах [14, 15]. Покажем основные принципы топологического разложения изображения и рассмотрим возможность его использования при сжатии.

Топологическая декомпозиция предполагает разложение изображения на структурные компоненты, представляющие собой определенные области из пикселов и соответствующие исследуемым объектам. Практически компоненты покрывают части изображения от локальных максимумов до локальных минимумов (рис. 1, *a*).

Каждая компонента характеризуется яркостью, на которой она появилась и, на которой прекратила существование. В точках локального минимума одна компонента сталкивается с другой. Компонента с более поздним появлением прекращает расширяться, а с более ранним идет до следующей точки минимума (рис. 1, b). Анализ взаимодействия компонент происходит на каждой итерации от 255 до 0, что соответствует значениям яркости на изображении в градациях серого. Процесс происходит до тех пор, пока какая-либо компонента не покроет все изображение.

Разницу между значениями появления и прекращения существования компоненты назовем длиной компоненты и обозначим буквой *L*.

Рассмотрим рис. 2, на котором каждый пиксел схематично представим в виде набора кубических 3D-объектов, количество которых в столбце равно значению яркости. Выделим сначала все компоненты с длиной L = 1 и разместим на отдельном изображении (рис. 2, *c*). Также отдельно отобразим исходное изображение без компонент с длиной L = 1 (рис. 2, *d*). По аналогии на рис. 2, *e*-*g* показан пример для $L \le 2$, где на отдельных изображениях размещены все компоненты с длинами $L \le 2$ и L > 2.

Обозначим исходное изображение буквой I, изображения с компонентами, удовлетворяющими условию $L \le k \ (k \in \{1, 2, ..., 255\}) - \mathbf{J}_{\text{дет}}$, а изображение, содержащее остальные компоненты при $L > k - \mathbf{J}_{\text{гл}}$. Тогда I определим в виде алгебраической суммы $\mathbf{J}_{\text{дет}}$ и $\mathbf{J}_{\text{гл}}$. При небольших значениях k изображение $\mathbf{J}_{\text{дет}}$ будет содержать детали, а $\mathbf{J}_{\text{гл}}$ - глобальные структуры. При увеличении параметра k в $\mathbf{J}_{\text{дет}}$ могут быть найдены более крупные исследуемые объекты.

В общем виде каждой компоненте соответствует матрица, размер которой совпадает с размерами исходного изображения. Ненулевые элементы матрицы описывают компоненту.

Заметим, что $\mathbf{J}_{\text{дет}}$ группирует в одно изображение все компоненты с L = 1, 2, ..., k, а $\mathbf{J}_{\text{гл}}$ — с L = k + 1, k + 2, ..., 255. Если отсортировать все компоненты по возрастанию их длин $L_{\alpha_1} \le L_{\alpha_2} \le ... \le L_{\alpha_k} \le ... \le L_{\alpha_p}$, то получим формулу из алгебраической суммы матриц:

$$\mathbf{I} = \mathbf{J}_{\alpha_1} + \mathbf{J}_{\alpha_2} + \ldots + \mathbf{J}_{\alpha_k} + \ldots + \mathbf{J}_{\alpha_p}, \tag{1}$$

где $\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_p$ — индексы компонент, каждой из которых соответствует матрица; p — общее количество компонент.



Рис. 1. Визуализация построения компонент: исходный объект с точками локального минимума и максимума (*a*); визуализация поглощения компонент (*b*)

Fig. 1. Visualization of component construction: initial object with local minimum and maximum points (*a*), visualization of component absorption (*b*)



Рис. 2. Визуализация топологической декомпозиции 3D-поверхности: исходная поверхность (*a*); исходная поверхность с отмеченными компонентами при длинах L = 1 (*b*) и $L \le 2$ (*e*); отдельно выделенные компоненты с длинами L = 1 (*c*) и L > 1 (*d*); компоненты с длинами $L \le 2$ (*f*) и L > 2 (*g*)

Fig. 2. Visualization of the topological decomposition of a 3D surface: original surface (*a*), original surface with marked components at L = 1 (*b*), separately selected components at L = 1 (*c*), separately selected components at L > 1 (*d*), original surface with marked components at length $L \le 2$ (*e*), components at $L \ge 2$ (*g*)

Будем считать, что в формуле (1) матрицы \mathbf{J}_{α_1} , \mathbf{J}_{α_2} , ..., \mathbf{J}_{α_k} содержат компоненты с длиной $L \leq k$, а компоненты $\mathbf{J}_{\alpha_{k+1}}$, $\mathbf{J}_{\alpha_{k+2}}$, ... \mathbf{J}_{α_p} — с длиной L > k. Тогда получим:

$$\mathbf{J}_{\text{det}} = \mathbf{J}_{\alpha_1} + \mathbf{J}_{\alpha_2} + \ldots + \mathbf{J}_{\alpha_{k'}} \mathbf{J}_{\text{fr}} = \mathbf{J}_{\alpha_{k+1}} + \mathbf{J}_{\alpha_{k+2}} + \ldots + \mathbf{J}_{\alpha_{p'}}.$$

При сжатии изображения с потерями отбросим $J_{дет}$ и получим, что $I = J_{гл}$. Параметр k влияет на степень детализации. Если убрать все детальные компоненты, то получится ровная поверхность. Соответственно, уменьшится энтропия изображения, что, в свою очередь, повлияет на коэффициент сжатия. Подобные действия были совершены в работе [16], но на другой теоретической базе.

Таким образом, как видно из визуализации, подход на основе топологической декомпозиции прост в применении и прозрачен на практике.

Компоненты, собранные в $J_{\text{дет}}$, не обязательно безвозвратно отсеивать. В данном случае их особенностью является предсказуемость, так как максимальное значение яркости будет равно k. Пример предобработки с использованием рассмотренного подхода показан на

рис. 3, b-f со значениями k, равными 2, 5, 10, 15 и 30 соответственно.

Развивая теорию топологической декомпозиции, можно разделить все компоненты на две группы так, чтобы в обеих оказались как можно более равномерные значения для достижения наименьшей энтропии. Однако возможность подобного равномерного разделения зависит сугубо от исходных данных.

Особенностью метода является то, что он позволяет выравнивать яркости в изолированных областях, которые имеют некоторую топологическую постоянную область. У других подходов, например, у алгоритма JPEG, количество оттенков может уменьшиться, из-за чего градиент на изображении начинает выглядеть как отдельные полосы (рис. 4). Предложенный подход удалил только изолированные области, представляющие шум, который определен по показателю k. Чем показатель k выше, тем больше будет потерь, и, следовательно, больше сжатие.

Декомпозиция на основе вейвлет-преобразования. Заметим, что схожим по принципу работы является дискретное вейвлет-преобразование. Существует множество видов вейвлетов. В настоящей работе вы-



Рис. 3. Предобработка изображения на основе топологической декомпозиции: исходное изображение (*a*); при *k* = 2, 5, 10, 15 исчез шум на черной арке справа, перекладине возле нее и белом столбе слева (*b*–*e*); при *k* = 30 с лица пропали некоторые белые блики, а предметы интерьера справа стали более однородными по цвету (*f*)

Fig. 3. Image preprocessing based on topological decomposition: the original image (*a*), at k = 2, 5, 10, 15 the noise on the black arch on the right, the crossbar next to it and the white pillar on the left disappeared (*b*–*e*), at k = 30 some white highlights disappeared from the face, interior items on the right became more uniform in color (*f*)

бран вейвлет CDF97, который используется в алгоритме JPEG 2000.

Вейвлеты раскладывают изображение на четыре компоненты, представляющие комбинацию высоких (H) и низких (L) частот. Выполнением несколько про-

стых тестов было определено, что обработка только HH частот ведет к недостаточно хорошим результатам при отсутствии заметных визуальных искажений. В связи с этим было принято решение дополнительно использовать коэффициенты LL и LH. Эксперименты показали,



Рис. 4. Проблема сжатия в алгоритме JPEG: исходное изображение с плавным градиентом (*a*); изображение после компрессии с резким переходом градиента в виде полос (*b*)

Fig. 4. Compression problem in the JPEG algorithm: original image with a smooth gradient (a), image after compression with a sharp gradient transition in the form of stripes (b)

что в этом случае визуально качество не ухудшается, но при этом достигаются лучшие показатели. Для этого коэффициенты подвергались делению на параметр D, причем D = 4 для HH, D = 2 для LL и LH.

В случае декомпозиции при работе с вейвлетами проявилась одна особенность — непосредственное влияние на все изображение, т. е. его сложно контролировать, когда необходимо локализовать действие. Это хорошо прослеживается в задачах сжатия.

Рассмотрим существующие подходы и выполним оценку влияния декомпозиции на качество изображения.

Результаты экспериментальных исследований

Критерии оценки качества изображений. Разделяют два направления для оценки качества изображений: без эталона (no-reference) [17] и с эталоном (reference-based) [18]. В первом случае происходит расчет некоторого коэффициента только по пикселам входной матрицы. Второе направление сравнивает исходное изображение с искаженным.

Один из базовых и часто используемых подходов — индекс пикового отношения сигнала к шуму (Peak Signal-to-Noise Ratio, PSNR), который вычисляется по формуле

$$PSNR = 10 \log_{10} \left(\frac{MAX^2}{MSE} \right),$$

где $MSE = \frac{1}{mn} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^{n-1} |I(i,j) - K(i,j)|^2$ — среднеквадратич-

ная ошибка (Mean Squared Error, MSE); $I \, u \, K$ — исходное и искаженное изображения; MAX — максимальное значение, принимаемое пикселом изображения K; $n \, u \, m$ — ширина и высота изображения.

В качестве аналога PSNR часто выбирают индекс структурного сходства (Structure SIMilarity, SSIM), который имеет вид

$$SSIM = \frac{(2\mu_I\mu_K + c_1)(2\sigma_{IK} + c_2)}{(\mu_I^2 + \mu_K^2 + c_1)(\sigma_I^2 + \sigma_K^2 + c_2)}$$

где $c_1 = (0,01 \times B)^2$, $c_2 = (0,03 \times B)^2$; μ_I и μ_K — средние значения яркостей изображений *I* и *K*; σ_I^2 и σ_K^2 — дисперсии *I* и *K*; σ_{IK} — ковариация *I* и *K*; *B* — динамический диапазон пикселов (255 для полутоновых изображений).

Также допустимо использовать и более простые показатели, как например, MSE или ее нормализованную версию (NRM):

$$NRM = \sqrt{\frac{MSE^2}{AVG(I^2)}}$$

где AVG — среднее арифметическое.

Исследование влияния декомпозиции на качество изображений. Для проведения экспериментов из набора данных ImageNet¹ выберем несколько изображений. На данных изображениях выполним операцию удаления шумовой составляющей с различными показателями длины компоненты.

Сжатие зависит от выбранного алгоритма. Чтобы провести наиболее чистое сравнение, использован базовый алгоритм Run-Length Encoding (RLE).

Изображения, обработанные на основе топологической декомпозиции с разной длиной компоненты, и те же самые изображения, обработанные на основе вейвлетов, были сжаты алгоритмом RLE. В качестве тестовых данных выбрано четыре разнородных изображения (рис. 5).

Опишем визуальные различия при декомпозиции. Искажения вейвлетов проявляются непосредственно на каждом пикселе и не образуют характерных зон, в отличие от топологической декомпозиции. Топологическая декомпозиция не затрагивает объекты, которые не входят в диапазон длин компонент k, поэтому в целом искажения не ухудшают изображение, но убирают локальные области (рис. 6).

Для исследования влияния топологической декомпозиции на качество изображений отбросим все детализирующие составляющие с длинами компонент, не превышающими значения k, равные 5, 10, 15 и 30. При увеличении параметра k отдельные области станут более однородными, что приведет к уменьшению энтропии изображений и будет влиять на их показатели качества. Тестирование выполнено с помощью сравнения сжатого и оригинального изображений с параметром k = 30. Данное значение k выбрано из следующих соображений: оно достаточно для отсеивания крупных компонент и слишком мало, чтобы появились заметные искажения.

Построение вейвлетов осуществлено с помощью языка программирования Python и библиотеки PyWavelets. Результаты исследований показаны в табл. 1, полученные при расчете процентного отношения, сколько сжатое изображение занимает места относительно исходного. В табл. 2 приведены значения влияния двух методов декомпозиции на качество изображения, которое оценено через показатели PSNR (меньше значение — лучший результат), SSIM (чем ближе к 0, тем лучше результат), MSE (чем больше значение, тем лучше результат) и NRM (результат лучше при стремлении к 1). Данные показатели рассчитаны с помощью Python модуля skimage. Визуально изображения после топологической декомпозиции показаны на рис. 7.

Результаты индексов оценки качества изображений (табл. 2) показали, что наилучшие результаты при топологической декомпозиции получены при наличии слабо зашумленных длинных объектов или фона. Вследствие этого наилучший результат оказался на изображении «Магазин», где много слабо зашумленных длинных объектов. На изображении «Лена» присутствуют однотонные зоны, обработка которых при топологической декомпозиции позволила уменьшить энтропию при сохранении высокого качества изображения, что подтверждают индексы PSNR, NRM и MSE, лишь незначительно уступая вейвлет-преобразованию по индексу SSIM. Остальные два примера при топологической

¹ [Электронный ресурс]. https://www.image-net.org (дата обращения: 28.10.2023).



Рис. 5. Тестовые изображения: Лена (*a*); Магазин (*b*); Камера (*c*); Книга (*d*) *Fig.* 5. Test images: Lena (*a*), Store (*b*), Camera (*c*), Book (*d*)



Рис. 6. Пример удаления деталей при топологической декомпозиции: исходное изображение (*a*); изображение после топологической декомпозиции при *k* = 30 (*b*). Метка А показывает, что на стене текстура стала более равномерной, а В и С указывают на пропавшие засветы на шляпе и щеке

Fig. 6. An example of detail removal during topological decomposition: original image (*a*), image after topological decomposition at k = 30 (*b*). Mark A shows that the texture on the wall has become more uniform. Marks B and C indicate missing highlights on the hat and cheek

Таблица 1. Сравнительный анализ сжатия изображений после вейвлет-преобразования и топологической декомпозиции алгоритмом RLE, %

Table 1. Comparative analysis of image compression after wavelet transform and topological decomposition using the RLE algorithm, %

Название изображения	Вейвлет-преобразование	Топологическая декомпозиция				
		<i>k</i> = 5	<i>k</i> = 10	<i>k</i> = 15	<i>k</i> = 30	
Лена	96	98	96	95	90	
Магазин	94	95	92	90	82	
Камера	91	96	96	95	95	
Книга	97	98	97	94	86	

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

	П			Название и	зображения	
ИНДСКС	декомпозиция	декомпозиция		Магазин	Камера	Книга
PSNR	Вейвлет-преобразование		38,8489	39,8741	39,7013	38,5273
	Топологическая декомпозиция	<i>k</i> = 5	54,3991	51,0493	52,6356	43,7139
		<i>k</i> = 10	47,8567	43,8544	48,6694	41,9514
		<i>k</i> = 15	44,3965	41,6243	45,0380	39,8521
		<i>k</i> = 30	38,8103	34,9010	40,6326	36,6074
NRM	Вейвлет-преобразование		0,0208	0,0221	0,0196	0,0262
	Топологическая декомпозиция	<i>k</i> = 5	0,0034	0,0046	0,0044	0,0081
		<i>k</i> = 10	0,0073	0,0105	0,0070	0,0099
		<i>k</i> = 15	0,0110	0,0136	0,0106	0,0127
		<i>k</i> = 30	0,0244	0,0488	0,0227	0,0209
MSE	Вейвлет-преобразование		8,4760	11,8659	6,9653	28,7065
	Топологическая декомпозиция	<i>k</i> = 5	0,2361	0,5106	0,3544	2,7649
		<i>k</i> = 10	1,0651	2,6769	0,8833	4,1489
		<i>k</i> = 15	2,3627	4,4735	2,0383	6,7276
	k = 30		11,6300	57,5903	9,3241	18,2569
SSIM	Вейвлет-преобразование		0,9761	0,98883	0,9779	0,9752
	Топологическая декомпозиция	<i>k</i> = 5	0,9986	0,99880	0,9968	0,9983
		<i>k</i> = 10	0,9960	0,99585	0,9949	0,9939
		<i>k</i> = 15	0,9929	0,99302	0,9926	0,9875
		<i>k</i> = 30	0,9769	0,95020	0,9808	0,9710

Таблица 2. Оценка качества изображений после вейвлет-преобразования и топологической декомпозиции, отн. ед. *Table 2*. Evaluation of image quality after wavelet transform and topological decomposition



Рис. 7. Результаты предобработки изображений после топологической декомпозиции с *k* = 30: Лена (*a*); Магазин (*b*); Камера (*c*); Книга (*d*)

Fig. 7. Results of image preprocessing after topological decomposition at k = 30: Lena (a), Store (b), Camera (c), Book (d)

декомпозиции продемонстрировали эффективность, сопоставимую с вейвлетом-преобразованием.

Степень сжатия в приведенных примерах является незначительной, однако стоит заметить, что в данной работе рассматривается не сам алгоритм сжатия, а влияние топологической декомпозиции на качество изображений. И результаты показали, что топологическая декомпозиция сохраняет высокое качество изображения при его сжатии. Это значит, что рассмотренный метод можно интегрировать в другие алгоритмы, например, описанные в работах [19, 20]. Преимуществом топологической декомпозиции является то, что она влияет только на выбранные области, что позволит избежать потерю качества для всего изображения.

При развитии предложенного подхода отсеянные компоненты можно также отдельно обработать для получения сжатия без потерь, что является темой дальнейшего исследования.

Литература

- 1. Доан Тиен Бан, Тропченко А.А. Быстрый алгоритм внутрикадрового кодирования для HEVC на основе вероятности выбора режима // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2020. Т. 20. № 1. С. 74–81. https://doi. org/10.17586/2226-1494-2020-20-1-74-81
- Said A. Machine learning for media compression: challenges and opportunities // APSIPA Transactions on Signal and Information Processing. 2018. V. 7. N 1. P. e8. https://doi.org/10.1017/ ATSIP.2018.12
- Soler M., Plainchault M., Conche B., Tierny J. Topologically controlled lossy compression // Proc. of the IEEE Pacific Visualization Symposium (PacificVis). 2018. P. 46–55. https://doi.org/10.1109/ pacificvis.2018.00015
- Ma H., Liu D., Yan N., Li H., Wu F. End-to-end optimized versatile image compression with wavelet-like transform // IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence. 2022. V. 44. N 3. P. 1247–1263. https://doi.org/10.1109/TPAMI.2020.3026003
- Yang X., Gong J., Wu L., Yang Z., Shi Y., Nie F. Reference-free lowlight image enhancement by associating hierarchical wavelet representations // Expert Systems with Applications. 2023. V. 213. P. 118920. https://doi.org/10.1016/j.eswa.2022.118920
- Сай С.В., Зинкевич А.В., Фомина Е.С. Сравнение дискретного косинус- и вейвлет-преобразований в системах сжатия RAWизображений // Компьютерная оптика. 2022. Т. 46. № 6. С. 929– 938. https://doi.org/10.18287/2412-6179-CO-1094
- Дворников С.В., Дворников С.С., Устинов А.А. Корреляционные свойства коэффициентов кратномасштабного преобразования типовых изображений // Информатика и автоматизация. 2022. Т. 21. № 5. С. 983–1015. https://doi.org/10.15622/ia.21.5.6
- Mun H., Yoon G.-J., Song J., Yoon S.M. Scalable image decomposition // Neural Computing and Applications. 2021. V. 33. N 4. P. 9137–9151. https://doi.org/10.1007/s00521-020-05677-x
- Лужков Ю.В., Тропченко А.Ю. Исследование алгоритмов сжатия с потерями на основе пространственной декомпозиции сигнала // Научно-технический вестник Санкт-петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики. 2008. Т. 8. № 13. С. 37–42.
- Zhou J., Ben J., Wang R., Zheng M., Du L. Lattice quad-tree indexing algorithm for a hexagonal discrete global grid system // ISPRS International Journal of Geo-Information. 2020. V. 9. N 2. P. 83. https://doi.org/10.3390/ijgi9020083

Заключение

В работе приведены результаты исследования возможности применения метода декомпозиции изображения по топологическим признакам для уменьшения энтропии с целью сжатия изображения при сохранении высокого качества. Показано, что предложенный подход позволяет разделить изображение на глобальные и детализирующие структуры с заданной степенью детализации. Уменьшение энтропии происходит за счет отбрасывания малозначащих элементов изображения, что приводит к искажению не всего изображения, а лишь определенных областей. Экспериментальные исследования подтвердили возможность применения предложенного подхода для сжатия изображений. Для этого проведена оценка качества изображений после их сжатия с использованием индексов PSNR, NRM, MSE и SSIM. Численные значения индексов показали, что метод топологической декомпозиции сопоставим с вейвлет-преобразованием CDF97, которое используется в JPEG 2000. Дальнейшее развитие метода топологической декомпозиции изображений может помочь разработать полноценный метод сжатия, как с потерями, так и без потерь.

References

- Doan Tien Ban, Tropchenko A.A. Fast in-frame coding algorithm for HEVC based on probability of mode selection. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2020, vol. 20, no. 1, pp. 74–81. (in Russian). https://doi. org/10.17586/2226-1494-2020-20-1-74-81
- Said A. Machine learning for media compression: challenges and opportunities. APSIPA Transactions on Signal and Information Processing, 2018, vol. 7, no. 1, pp. e8. https://doi.org/10.1017/ ATSIP.2018.12
- Soler M., Plainchault M., Conche B., Tierny J. Topologically controlled lossy compression. *Proc. of the IEEE Pacific Visualization Symposium (PacificVis)*, 2018, pp. 46–55. https://doi.org/10.1109/ pacificvis.2018.00015
- Ma H., Liu D., Yan N., Li H., Wu F. End-to-end optimized versatile image compression with wavelet-like transform. *IEEE Transactions* on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2022, vol. 44, no. 3, pp. 1247–1263. https://doi.org/10.1109/TPAMI.2020.3026003
- Yang X., Gong J., Wu L., Yang Z., Shi Y., Nie F. Reference-free lowlight image enhancement by associating hierarchical wavelet representations. *Expert Systems with Applications*, 2023, vol. 213, pp. 118920. https://doi.org/10.1016/j.eswa.2022.118920
- Sai S.V., Zinkevich A.V., Fomina E.S. Comparison of discrete cosine and wavelet transforms in RAW image compression systems. *Computer Optics*, 2022, vol. 46, no. 6, pp. 929–938. (in Russian). https://doi.org/10.18287/2412-6179-CO-1094
- Dvornikov S.V., Dvornikov S.S., Ustinov A.A. Analysis of the correlation properties of the wavelet transform coefficients of typical images. *Informatics and Automation*, 2022, vol. 21, no. 5, pp. 983– 1015. (in Russian). https://doi.org/10.15622/ia.21.5.6
- Mun H., Yoon G.J., Song J., Yoon S.M. Scalable image decomposition. *Neural Computing and Applications*, 2021, vol. 33, no. 4, pp. 9137–9151. https://doi.org/10.1007/s00521-020-05677-x
- 9. Luzhkov Yu.V., Tropchenko A. Yu. Analysis of algorithms of the lossy compression based on the space signal decomposition. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2008, vol. 8, no. 13, pp. 37–42. (in Russian)
- Zhou J., Ben J., Wang R., Zheng M., Du L. Lattice quad-tree indexing algorithm for a hexagonal discrete global grid system. *ISPRS International Journal of Geo-Information*, 2020, vol. 9, no. 2, pp. 83. https://doi.org/10.3390/ijgi9020083

- Jagadeesh P., Nagabhushan P., Kumar R.P. A novel image scrambling technique based on information entropy and quad tree decomposition // International Journal of Computer Science Issues. 2013. V. 10. N 2. P. 285–294.
- Li Z., Snavely N. Learning intrinsic image decomposition from watching the world // Proc. of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition. 2018. P. 9039–9048. https://doi.org/10.1109/CVPR.2018.00942
- Kizilkaya A., Elbi M.D. A fast approach of implementing the fourier decomposition method for nonlinear and non-stationary time series analysis // Signal Processing. 2022. V. 206. P. 108916. https://doi. org/10.1016/j.sigpro.2022.108916
- Еремеев С.В., Абакумов А.В., Андрианов Д.Е., Титов Д.В. Метод разложения изображения по топологическим признакам // Компьютерная оптика. 2022. Т. 46. № 6. С. 939–947. https://doi. org/10.18287/2412-6179-CO-1080
- Еремеев С.В., Абакумов А.В., Андрианов Д.Е., Ширабакина Т.А. Метод векторизации спутниковых снимков на основе их разложения по топологическим особенностям // Информатика и автоматизация. 2023. Т. 22. № 1. С. 110–145. https://doi.org/10.15622/ ia.22.1.5
- Xin G., Fan P. Soft compression for lossless image coding based on shape recognition // Entropy. 2021. V. 23. N 12. P. 1680. https://doi. org/10.3390/e23121680
- Kamble V., Bhurchandi K.M. No-reference image quality assessment algorithms: A survey // Optik. 2015. V. 126. N 11–12. P. 1090–1097. https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2015.02.093
- Saha A., Jonathan Wu Q.M. Full-reference image quality assessment by combining global and local distortion measures // Signal Processing. 2016. V. 128. P. 186–197. https://doi.org/10.1016/j. sigpro.2016.03.026
- Ibrahim R.A., Youssef S.M., Elkaffas S.M. An enhanced fractal image compression integrating quantized quadtrees and entropy coding // Proc. of the 11th International Conference on Innovations in Information Technology (IIT). 2015. P. 190–195. https://doi. org/10.1109/INNOVATIONS.2015.7381538
- Lee J., Gong Q., Choi J.Y., Banerjee T., Klasky S., Ranka S., Rangarajan A. Error-bounded learned scientific data compression with preservation of derived quantities // Applied Sciences. 2022. V. 12. N 13. P. 6718. https://doi.org/10.3390/app12136718

Авторы

Абакумов Артём Владимирович — аспирант, Муромский институт (филиал) ФГБОУ ВО «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых», Муром, 602264, Российская Федерация, sc 57215968427, https://orcid.org/0000-0001-5784-7147, artem210966@ yandex.ru

Еремеев Сергей Владимирович — кандидат технических наук, доцент, доцент, Муромский институт (филиал) ΦГБОУ ВО «Владимирский государственный университет имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых», Муром, 602264, Российская Федерация, sc 56673892800, https://orcid.org/0000-0001-8482-1479, sv-eremeev@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 25.09.2023 Одобрена после рецензирования 13.10.2023 Принята к печати 10.11.2023

- Jagadeesh P., Nagabhushan P., Kumar R.P. A novel image scrambling technique based on information entropy and quad tree decomposition. *International Journal of Computer Science Issues*, 2013, vol. 10, no. 2, pp. 285–294.
- Li Z., Snavely N. Learning intrinsic image decomposition from watching the world. Proc. of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, 2018, pp. 9039–9048. https://doi. org/10.1109/CVPR.2018.00942
- Kizilkaya A., Elbi M.D. A fast approach of implementing the fourier decomposition method for nonlinear and non-stationary time series analysis. *Signal Processing*, 2022, vol. 206, pp. 108916. https://doi. org/10.1016/j.sigpro.2022.108916
- Eremeev S.V., Abakumov A.V., Andrianov D.E., Titov D.V. Image decomposition method by topological features. *Computer Optics*, 2022, vol. 46, no. 6, pp. 939–947. (in Russian). https://doi. org/10.18287/2412-6179-CO-1080
- Eremeev S.V., Abakumov A.V., Andrianov D.E., Shirabakina T.A. Vectorization method of satellite images based on their decomposition by topological features. *Informatics and Automation*, 2023, vol. 22, no. 1, pp. 110–145. (in Russian). https://doi.org/10.15622/ia.22.1.5.
- Xin G., Fan P. Soft compression for lossless image coding based on shape recognition. *Entropy*, 2021, vol. 23, no. 12, pp. 1680. https:// doi.org/10.3390/e23121680
- Kamble V., Bhurchandi K.M. No-reference image quality assessment algorithms: A survey. *Optik*, 2015, vol. 126, no. 11–12, pp. 1090– 1097. https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2015.02.093
- Saha A., Jonathan Wu Q.M. Full-reference image quality assessment by combining global and local distortion measures. *Signal Processing*, 2016, vol. 128, pp. 186–197. https://doi.org/10.1016/j. sigpro.2016.03.026
- Ibrahim R.A., Youssef S.M., Elkaffas S.M. An enhanced fractal image compression integrating quantized quadtrees and entropy coding. *Proc. of the 11th International Conference on Innovations in Information Technology (IIT)*, 2015, pp. 190–195. https://doi. org/10.1109/INNOVATIONS.2015.7381538
- Lee J., Gong Q., Choi J.Y., Banerjee T., Klasky S., Ranka S., Rangarajan A. Error-bounded learned scientific data compression with preservation of derived quantities. *Applied Sciences*, 2022, vol. 12, no. 13, pp. 6718. https://doi.org/10.3390/app12136718

Authors

Artyom V. Abakumov — PhD Student, Murom Institute (Branch) of Vladimir State University, Murom, 602264, Russian Federation, SC 57215968427, https://orcid.org/0000-0001-5784-7147, artem210966@ yandex.ru

Sergey V. Eremeev — PhD, Associate Professor, Associate Professor, Murom Institute (Branch) of Vladimir State University, Murom, 602264, Russian Federation, se 56673892800, https://orcid.org/0000-0001-8482-1479, sv-eremeev@yandex.ru

Received 25.09.2023 Approved after reviewing 13.10.2023 Accepted 10.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Tom 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

NHOOPMAUNOHHIJIX TEXHONOFINÄ, MEXAHNKN N ONTIKKI

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1162-1170 УДК 004.94

Реализация нейронных сетей в методе многоуровневых компонентных цепей Максим Игоревич Кочергин⊠

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, 634050, Российская Федерация

maksim.i.kochergin@tusur.ru^{\equiv}, https://orcid.org/0000-0001-7404-8718

Аннотация

Введение. Проанализированы способы представления искусственных нейронных сетей в пакетах моделирования Simulink и SimInTech. Приведены примеры визуальных схем (моделей), построенных в данных пакетах моделирования с использованием блоков нейронных сетей. Показано, что этим моделям присущи такие недостатки, как отсутствие механизмов проведения структурной оптимизации искусственных нейронных сетей, отсутствие возможности их объединения в ансамбли и обучения нейронных сетей одновременно с работой модели объекта управления. При построении нейросетевых моделей управления затруднено использование специализированных библиотек Python (Keras, PyTorch и др.) и среды NeuroGenetic Optimizer (BioCompSystems). Метод. Показан способ реализации моделей искусственных нейронных сетей в формализме метода многоуровневых компонентных цепей. Согласно предложенному способу, построение моделей объекта и системы управления осуществляется на визуальном языке из готовых блоков (компонентов) с направленными и ненаправленными связями. Методика многоуровневого представления нейросетевых моделей управления связывает модели с другими инструментами метода компонентных цепей. Основные результаты. Предложены варианты моделей нейронных сетей с инкапсулированной и компонентной структурами. Первый вариант характеризуется компактностью модели управления, возможностью автоматизированной вариации и оптимизации структуры нейронной сети, возможностью изменения структуры сети во время работы модели при вычислительном эксперименте (сценарии). Второй вариант обладает возможностью детальной отладки, исследования процесса обучения сети и конструирования сети любой структурной сложности. Представлено описание связей основных разработанных компонентов — нейронной сети, блоков обучения, объединения нейросетей в ансамбль (бэггинг), чтения данных из файла, формирования выборок и слоев нейронной сети (входной, скрытый, выходной). Работа компонентов проиллюстрирована на реализации многоуровневой компьютерной модели неуправляемого полета тела (цели) и управляемого полета снаряда для решения задачи управления траекторией снаряда с целью поражения цели. Обсуждение. Разработанные библиотеки компонентов могут быть использованы в составе среды моделирования МАРС для построения многоуровневых систем управления объектами мультифизической природы.

Ключевые слова

нейронные сети, моделирование, метод компонентных цепей, машинное обучение, Simulink, SimInTech, среда моделирования MAPC

Ссылка для цитирования: Кочергин М.И. Реализация нейронных сетей в методе многоуровневых компонентных цепей // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1162–1170. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1162-1170

Implementation of neural networks in the method of multilevel component circuits Maksim I. Kochergin⊠

Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, 634050, Russian Federation maksim.i.kochergin@tusur.ru^{\box{24}}, https://orcid.org/0000-0001-7404-8718

Abstract

The paper analyzes the features of representing artificial neural networks in Simulink and SimInTech. Examples of visual schemes (models) built in these modeling environments using neural network blocks are given. The following

© Кочергин М.И., 2023

shortcomings of such representations are the lack of mechanisms: for carrying out structural optimization of neural networks, for combining them into ensembles, for training them synchronously with the simulation of the object model. It was noted that there are difficulties in using other tools, such as specialized Python libraries (Keras, PyTorch, etc.), the NeuroGenetic Optimizer (BioCompSystems) for building neural network control models. A method is shown to implement the representation of neural networks in the formalism of the method of multilevel component circuits, according to which the construction of models of an object and a control system is carried out in a visual language from ready-made blocks (components) with directional and non-directional connections. A technique has been developed for multilevel representation of neural network control models, which allows them to be combined with other tools of the component circuit method. Two options for representing neural networks are proposed: with an encapsulated structure and with a component structure. The first version of the representation is characterized by the compactness of the representation of the control model, the possibility of automated variation and optimization of the structure of the neural network, and the possibility of changing the structure of the network during the executing of the model within a computational experiment (scenario). The second option has the ability to perform detailed debugging and research of the network learning process, and the ability to construct a network of any structural complexity. The paper describes the main developed components with their connections: a neural network, a training block, an ensemble unit (bagging), a block for reading data from a file, a sampling block, a neural network layer (input, hidden, output). A multilevel computer model of the uncontrolled flight of a body (target) and the controlled flight of a projectile is presented as an example to illustrate the operation of the developed components to solve the problem of controlling a projectile to hit the target. The developed component libraries can be used as part of the MARS modeling environment to build multilevel control systems for objects of a multiphysics nature.

Keywords

neural networks, modeling, component circuits method, machine learning, Simulink, SimInTech, simulation environment MARS

For citation: Kochergin M.I. Implementation of neural networks in the method of multilevel component circuits. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1162–1170 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1162-1170

Введение

Большую роль в моделировании систем управления технологическими процессами и роботизированными системами играют интеллектуальные системы управления (ИСУ) [1]. ИСУ способны моделировать рассуждения человека-оператора во время принятия решения. Существующие в настоящее время комплексы программ не позволяют в полной мере разрабатывать сложные ИСУ. Универсальные пакеты моделирования (Simulink, SimInTech, Wolfram SystemModeler и др.) не дают возможности проектировать и разрабатывать иерархические системы управления [2], осуществляющие интеллектуальное и адаптивное [3] управление сложными динамическими системами. Это связано с тем, что универсальные пакеты предлагают только ограниченный набор методов и решают узкий класс задач. В свою очередь, специализированное программное обеспечение для построения моделей машинного обучения не позволяет моделировать объекты управления с достаточной точностью и не дает возможность отработки проектируемой интеллектуальной системы на уже имеющихся моделях технических объектов или процессов. Например, среда NeuroGenetic Optmizer компании BioCompSystems может по сформированной обучающей выборке «параметры системы — управляющее воздействие (или коэффициенты регулятора)» получить модель нейросетевой системы управления, но имеет сложности с интеграцией полученной модели управления с моделью исследуемого объекта в какой-либо среде или на языке программирования, которая может функционировать одновременно с реальным объектом при построении моделей типа цифрового двойника. С аналогичной проблемой можно столкнуться, используя библиотеки обучения искусственных

нейронных сетей (ИНС) типа Keras, РуТогсh языка Python, так как Python не имеет библиотек, требуемых для построения моделей технических, физических или других систем из готовых блоков, и его использование потребует программирования дополнительных процедур (чтение, предобработка данных и др.).

Косвенным подтверждением (кроме непосредственного анализа функциональных возможностей систем) недостатков существующих программно-инструментальных средств является потребность исследователей из разных предметных областей в разработке собственных решений [4–6]. Разработка таких ИСУ «с нуля» приводит к созданию узкоспециализированных систем, направленных на решение конкретной задачи, а их модификация в случае изменения объекта управления или масштабирование являются трудоемкими задачами, вплоть до разработки новых ИСУ, что делает актуальной разработку универсальных средств моделирования ИСУ, в том числе на базе ИНС.

Цель настоящей работы — разработка методики построения многоуровневых нейросетевых систем управления и реализация представления ИНС в формализме метода многоуровневых компонентных цепей (ММКЦ) [7], позволяющего составлять архитектуру ИНС из готовых блоков (компонентов) с направленными связями.

Обзор аналогов

В качестве основных аналогов среди пакетов моделирования с возможностью проектирования ИНС рассмотрим пакеты Simulink (MATLAB) [8] и SimInTech [9].

Расчетная схема нейронной сети в SimInTech представляет собой направленный граф из блоков библиотеки «Нейронные сети». Каждый блок (рис. 1) относится к одному из трех типов: один из слоев ИНС (IN, D и



Puc. 1. Нейронная сеть на схеме в SimInTech *Fig. 1.* Neural network on the scheme in SimInTech

OUT — «Входной слой», «Скрытый слой» и «Выходной слой»); Dataset — блок «Источник данных»; WORK MODE — блок «Режим работы», блок «График» для визуализации результатов обучения. Топология ИНС определена связями блоков. Расчетная схема ИНС должна начинаться с блока «Входной слой» и заканчиваться блоком «Выходной слой», но между ними могут следовать любые блоки-слои. По межблочным связям между блоками-слоями передаются не сами значения сигналов, а свойства слоя для подключения следующего слоя к предыдущему.

Блок WORK MODE позволяет выбрать пользователю один из режимов работы нейронной сети («Обучение», «Сравнение», «Определение») и может подавать на выход показатели точности обучения ИНС или непосредственно ее отклик. Так как между слоями ИНС в SimInTech передаются не данные, а свойства сети, такое представление не позволяет отслеживать значения сигналов на выходе какого-либо из слоев ИНС, в связи с чем делает невозможным использование алгоритмов обучения, отсутствующих в библиотеке разработчика, и может затруднять организацию работы нескольких ИНС при объединении их в ансамбли.

Из-за отсутствия блоков для обучения пакет Simulink не позволяет синхронно обучить ИНС с работой модели объекта управления. При этом Simulink доступен импорт в виде subsystems-блоков (рис. 2) любых ИНС, обученных в других модулях MATLAB: Statistics and Machine Learning Toolbox, Deep Learning Toolbox или Neural Network Fitting.

В отличие от пакета SimInTech, данная модель получает данные с каждого слоя, а подключение собственных m-функций на языке MATLAB расширяет возможности использования ИНС в Simulink в соответствии с задачами исследователя.

Общие недостатки рассмотренных подходов заключаются в отсутствии: механизмов структурной оптимизации ИНС (т. е. автоматизированного подбора конфигурации ИНС (число слоев, количество нейронов в них, вид функции активации) в сторону уменьшения/ упрощения с сохранением заданной точности работы (или скорости отклика) или в сторону увеличения для достижения указанной точности); инструментов отбора лучших моделей из числа обученных или объединения результатов их работы в ансамбли; возможности обучения ИНС синхронно с анализом модели объекта управления.

Далее кратко рассмотрим предлагаемое многоуровневое представление ИНС, направленное на устранение перечисленных недостатков.

Многоуровневые компьютерные модели

Приведем основные положения ММКЦ – основы предлагаемого представления ИНС, и его программной реализации в среде моделирования МАРС¹ [10].

Каждую модель представим компонентной цепью (КЦ) C = (K, B, N), состоящей из множеств: компонентов K, узлов N и ветвей B. Каждый K соответствует объекту, процессу или параметру решаемой задачи, обладает свойствами и описывается математической (на объектном слое) или алгоритмической (на логическом слое) моделью. N в модели соответствуют параметрам и

¹ Ознакомительная версия доступна по ссылке: https:// github.com/mikochergin/SE_MARS_demo_doc



Puc. 2. Импортированный блок нейросети в Simulink (*a*) и его декомпозиции на слои (*b*) и на элементы (*c*): input — связь входа, output — связь выхода, NNET — блок нейронной сети

Fig. 2. Imported neural network block in Simulink (a) and its decomposition into layers (b) and elements (c)

переменным. В каждом из N выполняются два топологических закона: закон равенства потенциальных переменных всех связей, подсоединенных к одному узлу, и закон равенства нулю алгебраической суммы потоковых переменных, входящих в один узел. Топологические связи K определяются множеством B. При анализе КЦ вычислительное ядро автоматически составляет системы уравнений на основе математических моделей K и топологических уравнений их связей [7].

Структура многоуровневой компьютерной модели, каждый слой которой содержит свою отдельную КЦ, представлена на рис. 3.

Структуру многоуровневой компьютерной модели определим слоями трех типов.

- Объектный слой содержит КЦ, описывающую модель исследуемого объекта, например, электрической цепи, кинематики и динамики робота-манипулятора. КЦ этого слоя имеют ненаправленные связи и составляются из: схемотехнических блоков (инерционных звеньев, интеграторов и др.), структурно-физических блоков (труба, насос, сепаратор и др.) или математических панелей для ввода модели в аналитическом виде.
- Логический слой содержит КЦ с направленными связями, определяющие сценарий проведения вычислительного эксперимента или обработки его результатов, а также алгоритм поведения объекта, чья модель в виде КЦ располагается на объектном слое. На этом слое осуществляются вспомогательные расчеты и операции.
- Визуальный слой содержит интерактивные средства управления моделью (регуляторы, цифровые табло и др.).

Компоненты логического слоя относятся к языку моделирования алгоритмических конструкций [11] и взаимодействуют согласно его механизму передачи сообщений: информационные сигналы передаются от источников к приемникам, инициируя поведение компонентов на каждой итерации расчета модели. Таким образом, включение ИНС в этот слой позволило организовать обучение ИНС одновременно с работой модели управления. Пример многоуровневой компьютерной модели представлен на рис. 4. На *объектном слое* с применением математических панелей заданы модели движения двух объектов, где силы *Fx*, *Fy* имитируют воздействие двигателей вдоль осей *OX*, *OY*.

Методика построения многоуровневых нейросетевых систем управления

В рамках формализма ММКЦ предложены два варианта моделей ИНС: с инкапсулированной и компонентной структурами, которые позволяют включать вычислительные модели ИНС в контур КЦ управления исследуемым объектом [12, 13].

Первый вариант модели ИНС подразумевает, что исследователь задает структуру ИНС с помощью параметризации одного блока (рис. 5), а второй — формирует структуру ИНС послойно (из нескольких блоков) с заданием их топологии.

Компонент ИНС располагается на логическом слое № 2, где он соединен с регулятором [14, 15] (или напрямую с узлом объекта управления) и различными измерителями и средствами визуализации. На этом слое располагаются переключательные модели типа диаграмм состояний [16], определяющие поведение подсистемы ИСУ на данном уровне иерархии, что позволяет переключаться по условию с одной управляющей ИНС на другую. Основная задача слоя — обеспечение работы ИСУ в режиме эксперимента (анализа режимов эксплуатации исследуемого объекта).

Инфраструктура для обучения ИНС, генерации выборок и оценки качества обучения располагается на *логическом слое* № 1. Слой может отсутствовать (или быть не активным), если сеть была обучена заранее и не предполагается ее «дообучение» [17, 18].

Недостаток первой модели — ограничение архитектуры проектируемой ИНС структурой сети прямого распространения. Для другой архитектуры необходима разработка нового типового компонента. Преимущества данной модели ИНС в ММКЦ: компактное представление КЦ управления единым блоком; возможность динамического (во время работы модели) изменения



Puc. 3. Структура многоуровневой компьютерной модели *Fig. 3.* The structure of a multilevel computer model



Рис. 4. Многоуровневая компьютерная модель полета тела (цель) и снаряда: интерфейс управления моделью (*a*); визуализация результатов моделирования (*b*); вспомогательные расчеты и преобразования (*c*); модели объектов (*d*)
 Fig. 4. Multilevel computer model of the flight of the body (target) and projectile: model control interface (*a*); visualization of modeling results (*b*); supporting calculations and transformations (*c*); object models (*d*)

структуры ИНС при добавлении/удалении признаков в выборке данных или в сценариях исследования результатов работы ИНС с различными параметрами; возможность автоматизированной вариации и оптимизации структуры нейронной сети [19, 20]. Второй вариант модели ИНС в ММКЦ — с компонентной структурой, заключается в том, что нейросеть (рис. 5) представлена в декомпозированном виде и составлена исследователем из компонентов типа «Входной слой», «Скрытый слой», «Выходной слой».



Puc. 5. Концептуальное представление нейросетевой модели управления объектом *Fig. 5.* Conceptual representation of a neural network model of object control

Название	Изображение	Описание
Нейронная сеть (инкапсулирован- ная структура)	$S_{0} \circ S_{1} \circ $ $S_{2} \circ $ $S_{0} \circ S_{n+1} \circ $ $S_{n} \circ S_{n+m} \circ $	Используется для задания архитектуры ИНС и получения отклика на входные данные. Входы: S_0 — для обновленных в процессе обучения весовых коэффициентов (от компонента «Блок обучения»); S_1 — для управляющего сигнала, переводящего ИНС из состояния простоя в состояние работы и наоборот; $S_2 \dots S_n$ — динамически изменяемое количество узлов для входных данных, на которые ИНС формирует отклик. Выход: $S_{n+1} \dots S_{n+m}$ — для сформированного отклика. Параметры: количество слоев и нейронов, список функций активации.
Блок обучения	$S_4 \circ$ $S_2 \circ$ $S_1 \circ$ $S_1 \circ$ $S_0 \circ$ $S_1 \circ$ $S_0 \circ$ $S_7 \ldots S_n$	Используется для обучения ИНС на выборке данных. Входы: S_0, S_1 — для обучающей выборки, S_2, S_3 — для тестовой выборки, S_4 — для сигнала управляющего режимом обучения; $S_7 \dots S_n$ — для реального отклика ИНС. Выход: S_5 — для вывода ошибки; S_6 — для рассчитанных весов ИНС. Параметры: метрика точности, метод оптимизации, количество эпох обучения, batch size, learning rate.
Бэггинг	$S_1 \circ -$ $\vdots \circ -$ S_n Bagging $- \circ S_0$	Используется для построения ансамблей ИНС. Входы: $S_1 ldots S_n$ — для откликов ИНС. Выход: S_0 — для рассчитанного усредненного отклика. Параметры: веса ИНС, режим усреднения (методом большинства голосов — для дискретной величины, среднее арифметическое — для непрерывной величины).
Чтение из файла	CSV – o <i>S</i> ₀	Используется для чтения наборов данных из файла. Выход: S ₀ — для массива считанных признаков/меток. Параметры: тип переменной (признак — матрица, метка — вектор), номера столбцов для чтения, тип файла.
Формирование вы- борки	S_0 - S_2 - S_3 - S_1 - S_4 - S_5	Используется для разбиения наборов данных на обучающую и тесто- вую выборки. Входы: $S_0, S_1 - $ для считанных значений (признаков и меток). Выходы: $S_2, S_3 - $ для обучающей выборки (признаки и отклик), S_4 , $S_5 - $ для тестовой выборки. Параметры: доля обучающей выборки, константа для воспроизведе- ния случайного распределения выборки.
Входной, скрытый, выходные слои (компонентная структура)	$S_{0} \mathbf{O} - \begin{array}{c} S_{1} \mathbf{O} \\ \text{input} - \mathbf{O} S_{2} \\ S_{3} \mathbf{O} \\ S_{1} \mathbf{O} \\ S_{0} \mathbf{O} - \begin{array}{c} \text{hidden} \\ \text{output} - \mathbf{O} S_{2} \\ S_{0} \mathbf{O} - \begin{array}{c} \text{output} \\ \text{output} - \mathbf{O} S_{2} \end{array}$	Используется для задания архитектуры ИНС, топологии связей и получения отклика на входные данные. Входы: S_0 — для входных данных (признаков), на которые ИНС формирует отклик; S_1 — для обновленных в процессе обучения весовых коэффициентов (от компонента «Блок обучения»); S_3 — для управляющего сигнала, переводящего ИНС из состояния простоя в состояние работы и наоборот (только у компонента «Входной слой»). Выход: S_2 — для сформированного отклика. Параметры: количество нейронов в слое, функции активации.

Таблица. Описание реализованных компонентов искусственных нейронных сетей *Table*. Description of the implemented components of neural networks

Такая модель позволяет: строить ИНС произвольной структуры (добавлять обратные связи, параллельно работающие слои); рассматривать ИНС как объект исследования, а не инструмент, что дает возможность оценить ход вычисления отклика, ход ее обучения, выходные значения отдельных слоев и т. д., при этом сохраняя функцию ИНС как системы управления объектом. Описание разработанных компонентов ИНС в формализме ММКЦ приведено в таблице.

Внешний вид графического интерфейса для настройки компонентов типа «Блок обучения» и «Нейронная сеть» показан на рис. 6.











Рис. 7. Фрагмент многоуровневой модели для обучения нейросети: инфраструктура для обучения сети (*a*); нейросетевая модель управления (*b*); визуализация результатов моделирования (*c*)

Fig. 7. Fragment of a multilevel model for training a neural network: infrastructure for network training (*a*); neural network control model (*b*); visualization of simulation results (*c*)

Пример многоуровневой нейросетевой модели управления

На рис. 7 представлено дополнение к многоуровневой модели на рис. 4. Компоненты «Чтение из CSV» (CSV — формат текстового файла с данными) считывают значения независимых переменных (признаков dx, dy — проекций расстояния между телом и снарядом) и зависимых переменных (прогнозируемых сил Fx, Fy) из файлов. Далее компонентом «Выборка» формируются тестовая и обучающая выборки, подаваемые на вход «Блоку обучения», обновляющему весы ИНС. Компонент «Нейронная сеть 1» регулирует значения Fx, Fy, которые на этом слое являются приемниками, а на объектном — источниками и корректируют движение снаряда вдоль осей.

Заключение

Анализ особенностей представления нейронных сетей в современных пакетах моделирования выявил в качестве недостатков отсутствие механизмов: структурной оптимизации нейронных сетей; отбора лучших моделей из числа обученных или объединения их результатов работы в ансамбли; обучения нейросетей синхронно с анализом модели объекта управления.

Предложенная методика многоуровневого моделирования нейросетевых моделей управления позволила включить их компонентные модели в многоуровневый контур управления объектом, в том числе в иерархические системы управления.

В рамках методики разработаны два варианта моделей нейронных сетей: с инкапсулированной структурой, задаваемой параметрами одного блока, и компонентной структурой, задаваемой послойно (из нескольких блоков) с указанием их топологии.

Преимуществами предложенных вариантов моделей являются: наличие возможностей для составления произвольной архитектуры нейронной сети из визуальных блоков; автоматизированные вариации и оптимизации структуры нейронной сети; обучение нейросети на результатах моделирования объекта управления во время расчета его модели (что актуально при взаимодействии компьютерной модели с реальным объектом, например, при реализации цифровых двойников); построение сложных нейросетевых моделей управления, включая

Литература

- Кориков А.М. Интеллектуальное управление в технических системах // Научный вестник Новосибирского государственного технического университета. 2014. № 1(54). С. 18–26.
- Онуфрей А.Ю., Разумов А.В., Какаев В.В. Метод оптимизации структуры в иерархических распределенных системах управления // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23. № 1. С. 44–53. https://doi. org/10.17586/2226-1494-2023-23-1-44-53
- Колесников А.А., Колесников А.А., Кузьменко А.А. Метод АКАР и теория адаптивного управления в задачах синтеза нелинейных систем управления // Мехатроника, автоматизация, управление. 2017. Т. 18. № 9. С. 579–589. https://doi.org/10.17587/mau.18.579-589
- Dayev Z.A., Kairakbayev A.K., Sultanov N.Z. Development of humidity of natural gas control system based on linear programming methods // Energy Systems. 2021. V. 12. N 1. P. 233–245. https://doi. org/10.1007/s12667-019-00353-z
- Matveew M., Kabulova E., Kanisheva O. Fuzzy modeling for steel making processes // ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences. 2015. V. 10. N 18. P. 8271–8277.
- Евсюткин И.В., Марков Н.Г. Глубокие искусственные нейронные сети для прогноза значений дебитов добывающих скважин // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. 2020. Т. 331. № 11. С. 88–95. https://doi.org/10.1879 9/24131830/2020/11/2888
- Дмитриев В.М., Ганджа Т.В., Кочергин М.И. Матричнотопологический анализ компонентных цепей // Вестник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. 2023. № 62. С. 25–35. https://doi. org/10.17223/19988605/62/3
- Pantelic V., Postma S., Lawford M., Jaskolka M., Mackenzie B., Korobkine A., Bender M., Ong J., Marks G., Wassyng A. Software engineering practices and simulink: bridging the gap // International Journal on Software Tools for Technology Transfer. 2018. V. 20. N 1. P. 95–117. https://doi.org/10.1007/s10009-017-0450-9
- Мызникова В.А., Устименко В.В., Чубарь А.В. Построение нечётких регуляторов для систем управления автономных объектов в среде SimInTech // Космические аппараты и технологии. 2019. Т. 3. № 1(27). С. 22–27. https://doi.org/10.26732/2618-7957-2019-1-22-27
- Дмитриев В.М., Ганджа Т.В. Методика построения многоуровневых компонентных цепей для моделирования химико-технологических систем // Доклады Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники. 2017. Т. 20. № 3. С. 98–102. https://doi.org/10.21293/1818-0442-2017-20-3-82-86
- Дмитриев В.М., Ганджа Т.В., Ганджа В.В., Мальцев Ю.И. СВИП — система виртуальных инструментов и приборов. Томск: В-Спектр, 2014. 216 с.
- Gandzha T.V., Dmitriev V.M., Zaichenko T.N., Aksenova N.V. Computer modeling of chemical process systems with distributed parameters by means of component circuit method with non-uniform vector coupling // Petroleum and Coal. 2021. V. 63. N 1. P. 68–77.
- Karelin A.E., Maystrenko A.V., Svetlakov A.A., Dmitriev V.M., Gandzha T.V., Aksenova N.V. Synthesis of an automatic control method for major oil pipelines based on inverse dynamics problem concept // Petroleum and Coal. 2018. V. 60. N 1. P. 152–156.
- 14. Цвенгер И.Г., Низамов И.Р. Применение нейросетевых регуляторов в системах управления электроприводами // Вестник Технологического университета. 2017. Т. 20. № 8. С. 111–114.
- 15. Суханова Н.В. Разработка и применение нейросетевых моделей в автоматизации управления оборудованием и технологическими процессами // Автоматизация и моделирование в проектировании и управлении. 2022. № 1(15). С. 24–32. https://doi.org/10.30987/2658-6436-2022-1-24-32
- Kochergin M.I. Interpretation of the statechart diagram into a multilevel simulation language // Доклады Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники. 2017. Т. 20. № 4. С. 122–125. https://doi.org/10.21293/1818-0442-2017-20-4-122-125

их объединение в ансамбли; отладка и анализ нейросетевых моделей как объекта исследования.

References

- 1. Korikov A.M. Intellectual management in technical systems. *Scientific Bulletin of NSTU*, 2014, no. 1(54), pp. 18–26. (in Russian)
- Onufrey A.Yu., Razumov A.V., Kakaev V.V. A method of optimizing the structure of hierarchical distributed control systems. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 1, pp. 44–53. (in Russian). https://doi. org/10.17586/2226-1494-2023-23-1-44-53
- Kolesnikov A.A., Kolesnikov Al.A., Kuzmenko A.A. ADAR method and theory of adaptive control in the tasks of synthesis of the nonlinear control systems. *Mekhatronika, Avtomatizatsiya, Upravlenie*, 2017, vol. 18, no. 9, pp. 579–589. (in Russian). https:// doi.org/10.17587/mau.18.579-589
- Dayev Z.A., Kairakbayev A.K., Sultanov N.Z. Development of humidity of natural gas control system based on linear programming methods. *Energy Systems*, 2021, vol. 12, no. 1, pp. 233–245. https:// doi.org/10.1007/s12667-019-00353-z
- Matveew M., Kabulova E., Kanisheva O. Fuzzy modeling for steel making processes. *ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences*, 2015, vol. 10, no. 18, pp. 8271–8277.
- Evsyutkin I.V., Markov N.G. Deep artificial neural networks for forecasting debit values for production wells. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering*, 2020, vol. 331, no. 11, pp. 88–95. (in Russian). https://doi.org/10.18799/24131830/2 020/11/2888
- Dmitriev V.M., Gandzha T.V., Kochergin M.I. Matrix topological analysis of component circuits. *Tomsk State University Journal of Control and Computer Science*, 2023, no. 62, pp. 25–35. (in Russian). https://doi.org/10.17223/19988605/62/3
- Pantelic V., Postma S., Lawford M., Jaskolka M., Mackenzie B., Korobkine A., Bender M., Ong J., Marks G., Wassyng A. Software engineering practices and simulink: bridging the gap. *International Journal on Software Tools for Technology Transfer*, 2018, vol. 20, no. 1, pp. 95–117. https://doi.org/10.1007/s10009-017-0450-9
- Myznikova V.A., Ustimenko V.V., Chubar A.V. Fuzzy controllers construction in the simintech environment. *Spacecrafts & Technologies*, 2019, vol. 3, no. 1(27), pp. 22–27. (in Russian). https:// doi.org/10.26732/2618-7957-2019-1-22-27
- Dmitriev V.M., Gandzha T.V. The method of constructing multilevel component chains for modeling chemical-technological systems. *Proceedings of TUSUR University*, 2017, vol. 20, no. 3, pp. 98–102. (in Russian). https://doi.org/10.21293/1818-0442-2017-20-3-82-86
- Dmitriev V.M., Gandzha T.V., Gandzha V.V., Maltcev Iu.I. SVID System of Virtual Instruments and Devices. Tomsk, V-Spektr, 2014, 216 p. (in Russian)
- Gandzha T.V., Dmitriev V.M., Zaichenko T.N., Aksenova N.V. Computer modeling of chemical process systems with distributed parameters by means of component circuit method with non-uniform vector coupling. *Petroleum and Coal*, 2021, vol. 63, no. 1, pp. 68–77.
- Karelin A.E., Maystrenko A.V., Svetlakov A.A., Dmitriev V.M., Gandzha T.V., Aksenova N.V. Synthesis of an automatic control method for major oil pipelines based on inverse dynamics problem concept. *Petroleum and Coal*, 2018, vol. 60, no. 1, pp. 152–156.
- Tevenger I.G., Nizamov I.R. Application of neural network controllers in the electric drive control systems. *Bulletin of the Technological University*, 2017, vol. 20, no. 8, pp. 111–114. (in Russian)
- Sukhanova N. Developing and applying neural network models in automating equipment control and technological processes. *Automation and Modelling in Design and Management*, 2022, no. 1(15), pp. 24–32. (in Russian). https://doi.org/10.30987/2658-6436-2022-1-24-32
- Kochergin M.I. Interpretation of the statechart diagram into a multilevel simulation language. *Proceedings of TUSUR University*, 2017, vol. 20, no. 4, pp. 122–125. https://doi.org/10.21293/1818-0442-2017-20-4-122-125
- 17. Ezhov A.A., Cherepnev A.S. The uplearning of the Hopfield neural network: the search for a global minimum of a functional and the model of rapid eye movement. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2009, vol. 21, no. 5, pp. 10–20. (in Russian)

- Ежов А.А., Черепнев А.С. Дообучение нейронной сети Хопфилда: поиск глобального минимума функционала и модель быстрого сна // Математическое моделирование. 2009. Т. 21. № 5. С. 10–20.
- Дмитриенко В.Д., Заковоротный А.Ю. Решение проблемы дообучения классических нейронных сетей // Автоматизированные технологии и производства. 2015. № 4 (10). С. 32–40.
- Федотов Д.В., Попов Е.А., Охорзин В.А. Оптимизация структуры сверточной нейронной сети с помощью самоконфигурируемого эволюционного алгоритма в одной задаче идентификации // Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2015. Т. 16. № 4. С. 857–863.
- Рыбин П.К., Горин Р.В. Метод оптимизации структуры нейронной сети для задачи планирования подвода поездов к предпортовым станциям // Вестник транспорта Поволжья. 2017. № 5(65). С. 55–63.

Автор

Кочергин Максим Игоревич — кандидат технических наук, доцент, Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск, 634050, Российская Федерация, sc 57211392793, https://orcid.org/0000-0001-7404-8718, maksim.i.kochergin@tusur.ru

Статья поступила в редакцию 12.07.2023 Одобрена после рецензирования 19.10.2023 Принята к печати 10.11.2023

- Dmitrienko V.D., Zakovorotnyi A.Y. Solving the problem of additional training of classical neural networks. *Automation of technologies and production*, 2015, no. 4 (10), pp. 32–40. (in Russian).
- Fedotov D.V., Popov E.A., Okhorzin V.A. Optimisation of convolutional neural network structure with self-configuring evolutionary algorithm in one identification problem. *Vestnik SibGAU*, 2015, vol. 16, no. 4, pp. 857–863. (in Russian)
- Rybin P.K., Gorin R.V. Method of optimizing of the neural network structure for planning train arrival at pre-port stations. *Vestnik transporta Povolzhya*, 2017, no. 5 (65), pp. 55–63. (in Russian)

Author

Maksim I. Kochergin — PhD, Associate Professor, Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, 634050, Russian Federation, sc 57211392793, https://orcid.org/0000-0001-7404-8718, maksim.i.kochergin@tusur.ru

Received 12.07.2023 Approved after reviewing 19.10.2023 Accepted 10.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **VİTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1171-1177 УДК 004.258

Алгоритм контроллера нечеткой логики для размещения файлов в системе хранения данных

Татьяна Михайловна Татарникова¹, Евгений Дмитриевич Архипцев²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, 197002, Российская Федерация

^{1,2} Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197022, Российская Федерация

¹ tm-tatarn@yandex.ru^{\overline}, http://orcid.org/0000-0002-6419-0072

² lokargenia@gmail.com, https://orcid.org/0009-0006-3001-953X

Аннотация

Введение. Обсуждается задача организации многоуровневого хранения данных. Информация со временем теряет свою актуальность и стоимость ее хранения на носителях высокой доступности, например твердотельных накопителях, становится нецелесообразной. До сих пор размещение новых файлов в системе хранения данных решается горизонтально — без учета многоуровневой организации системы. Миграция файлов между уровнями системы хранения данных выполняется с течением времени, когда накапливается статистика по частоте их запроса. Все файлы обладают метаданными, такими как тип, размер, дата создания и другими, из которых можно выделить некоторую информацию об их важности. Это позволяет реализовать распределение данных по уровням системы хранения на ее входе. Метод. Предложена современная система хранения данных, представленная четырьмя уровнями. Первый уровень Hi-End предназначается для хранения критически важных данных с требованиями максимальной скорости доступа и надежности. Второй уровень Upper Mid-Range предназначается для корпоративных приложений, требующих высокой скорости доступа. Третий уровень Mid-Range предлагается использовать для организации файловых хранилищ, а четвертый — Entry Level — для создания резервных копий и архивов. В предложенном алгоритме размещения файлов по уровням системы хранения данных учитываются метрики, указывающие на требования к хранению и выбору уровня системы хранения данных, соответствующего предъявляемым требованиям. К таким метрикам относятся степень доступности (скорость предоставления информации), важность (стоимость потери данных в случае аппаратного и программного сбоев), срок хранения и частота запроса. Метрики выделяются из метаданных сохраняемых файлов. Основные результаты. Предложено новое решение, основанное на функциях контроллера нечеткой логики. Алгоритм его работы может быть интегрирован в систему хранения данных до процесса записи нового файла. Алгоритм включает три основных шага. На первом шаге выполняется анализ файловых метрик для формирования соответствующих им входных нечетких множеств. На втором шаге для формирования итогового нечеткого множества применяется логическая модель. На завершающем этапе происходит получение результата нечеткого вывода и размещение файла на соответствующий уровень системы хранения данных. Приведен пример работы контролера для файлов с разными значениями метрических характеристик. Обсуждение. Контроллер нечеткой логики может быть интегрирован в работу многоуровневой системы хранения данных.

Ключевые слова

большие данные, многоуровневая система хранения данных, требования к хранению данных, метрики файлов, контроллер нечеткой логики, рациональное хранение

Ссылка для цитирования: Татарникова Т.М., Архипцев Е.Д. Алгоритм контроллера нечеткой логики для размещения файлов в системе хранения данных // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1171–1177. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1171-1177

[©] Татарникова Т.М., Архипцев Е.Д., 2023

Fuzzy logic controller algorithm for placing files in a data storage system Tatiana M. Tatarnikova^{1⊠}, Evgeny D. Arkhiptsev²

¹ Saint Petersburg State University of Aerospace Instumentation, Saint Petersburg, 197002, Russian Federation ^{1,2} Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, 197022, Russian Federation

¹ tm-tatarn@yandex.ru^{\overline{1}}, http://orcid.org/0000-0002-6419-0072

² lokargenia@gmail.com, https://orcid.org/0009-0006-3001-953X

Abstract

The problem of organizing multi-level data storage is discussed. Information loses its relevance over time and the cost of storing it on highly available media, such as solid-state drives, becomes impractical. Until now, the placement of new files in the data storage system is decided horizontally — without taking into account the multi-level organization of the system. The file migration between storage system tiers occurs over time as statistics on the frequency of requested files are accumulated. All files have metadata, such as type, size, creation date and others, from which some information about the importance of the information can be extracted and then the distribution by levels of the data storage system can be implemented at the system input. A modern data storage system represented by four levels is proposed. The first Hi-End level is intended for storing critical data with the requirements of maximum access speed and reliability. The second level, Upper Mid-Range, is intended for enterprise applications that require high access speeds. The third level, Mid-Range, is proposed to be used for organizing file storage, and the fourth, Entry Level, is proposed to be used for creating backup copies and archives. The proposed algorithm for arranging files across tiers of a data storage system takes into account metrics indicating storage requirements and selecting a level of a data storage system that meets the requirements. These metrics include availability (speed of information delivery), importance (cost of data loss due to hardware and software failures), retention period, and request frequency. Metrics are extracted from the metadata of saved files. A new solution based on the functions of a fuzzy logic controller is proposed. Its operation algorithm can be integrated into the data storage system before the process of writing a new file. The algorithm includes three main steps. At the first step, file metrics are analyzed to form the corresponding input fuzzy sets. At the second step, a logical model is used to form the final fuzzy set. At the final stage, the fuzzy output result is obtained and the file is placed at the appropriate level of the data storage system. An example of how the controller works for files with different values of metric characteristics is given. A fuzzy logic controller can be integrated into the operation of a multi-level data storage system.

Keywords

big data, multi-level data storage system, data storage requirements, file metrics, fuzzy logic controller, rational storage **For citation:** Tatarnikova T.M., Arkhiptsev E.D. Fuzzy logic controller algorithm for placing files in a data storage system. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1171–1177 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1171-1177

Введение

Проблема больших данных в основном обсуждается в контексте их обработки специальными автоматизированными инструментами для получения статистики, выполнения анализа, прогнозов и принятия решений [1–3]. Тем не менее, физические процессы хранения больших данных остаются важными и также требуют поиска инструментов автоматизации в условиях ограниченности физических ресурсов [4, 5]. В частности, организация рационального хранения массивов неоднородных данных является одной из таких приоритетных задач.

Большие данные, как известно, хранятся в облаке. Рынок облачных вычислений в России растет на 30– 40 % в год, при этом наибольшим спросом пользуются сервисы «приложение как услуга» (SaaS) и «инфраструктура как услуга» (IaaS). Причина — устаревание информационных систем компаний, которые в целях оптимизации аппаратно-программных ресурсов обращаются к облачным решениям [6, 7].

Инфраструктуру облачного хранилища образуют системы хранения данных (СХД). СХД отличается сложной архитектурой, возможностью объединять носители разной физической природы в сеть передачи данных¹, наличием отдельного программного обеспечения для

¹ Recommendation Y.3510: Cloud computing infrastructure requirements. Geneva: ITU-T, 2013. [Электронный ресурс].

управления СХД² технологиями резервного копирования³, сжатия и виртуализации [8].

В свою очередь управление СХД подразумевает не только управление процессами записи-чтения, но и объемами данных — организацию рационального хранения, основанного на важности данных, стоимости их хранения и требований к срокам хранения [9]. Требованиями законов и норм Российской Федерации жестко закреплены сроки хранения информации практически во всех важнейших сферах: труд и занятость населения, информация и информатизация, техническое регулирование, образовательная, научная и культурная деятельность, медицина и фармацевтика. Также очевидна тенденция к переводу архивных документов в цифровой вид — бессрочное хранение. Согласно Федеральному закона № 374-ФЗ⁴, операторы связи

⁴ Федеральный закон № 374-ФЗ от 23.11.2020 г. О внесении изменений в части первую и вторую Налогового кодекса

Режим доступа: https://www.itu.int/rec/T-REC-Y.3510-201305-S (дата обращения: 08.10.2023).

² Recommendation Y.3501: Cloud computing framework and high-level requirements. Geneva: ITU-T, 2013 [Электронный pecypc]. Режим доступа: https://www.itu.int/ITU-T/ recommendations/rec.aspx?rec=11917 (дата обращения: 08.10.2023).

³ Recommendation Y.3520: Cloud computing framework for end-to-end resource management. Geneva: ITU-T, 2015 [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.itu.int/ rec/T-REC-Y.3520-201509-I (дата обращения: 08.10.2023).

обязаны хранить на территории Российской Федерации информацию о фактах приема, передачи, доставки и/ или обработки голосовой информации, текстовых сообщений, изображений, звуков, видео- или иных сообщений пользователей услугами связи — в течение трех лет с момента окончания осуществления таких действий. Таким образом, хранение автоматически включается в тариф на оказание услуг связи.

Несмотря на то, что СХД строятся по иерархическому принципу, автоматизация распределения данных по уровням СХД остается частично решенной: имеет место только горизонтальное размещение, а миграция данных между уровнями хранилища реализуется администратором СХД. Так, в [2-5] рассмотрены новые технологии распределенного хранения данных, суть которых сводится к обеспечению приемлемой пропускной способности СХД через кластеризацию и надежности хранения через избыточную репликацию данных. Анализ работ [4-10] показал наличие противоречия: с одной стороны, для СХД по-прежнему обсуждаются традиционные вычислительные характеристики, оставляя без внимания стоимость хранения, а с другой стороны, очевидно, что хранение разных данных требует разной оплаты предоставления услуги. Но последнее в настоящий момент решается через миграцию файлов с течением времени, когда накапливается статистика по частоте запрашиваемых данных.

В настоящей работе предлагается алгоритм распределения данных в СХД с многоуровневой организацией еще до процесса записи нового файла. Алгоритм основан на работе контроллера нечеткой логики.

Материалы и методы

Процесс старения (потери актуальности) данных оценивается частотой обращений к ним во времени и описывается гауссовской кривой: количество обращений к свежим данным мало, по мере распространения сведений о новых данных число обращений возрастает, затем данные теряют свою актуальность, и число обращений к ним падает, и к архивированным данным количество обращений существенно меньше пикового [11]. Это свойство используется в создании многоуровневых СХД. Выделяют четыре уровня СХД (рис. 1):

- уровень 1 (Hi-End) образуют SSD (Solod-State Drive) твердотельные накопители и соответственно массив дисков из них. Хранение данных характеризуется высокими стоимостью, надежностью, функциональностью и масштабируемостью. Здесь размещаются критически важные данные с требованиями максимальной (для онлайн-решений) производительности и надежности;
- уровень 2 (Upper Mid-Range) образуют массивы дисков, обмен данных с которыми осуществляется по высокопроизводительному протоколу SAS (Serial Attached SCSI) или FC (Fibre Channel). Хранение характеризуется от средней до высокой стоимости, высокой надежностью, достаточной функцио-

Российской Федерации и отдельные законодательные акты Российской Федерации.

нальностью. На этом уровне размещаются важные приложения, например, корпоративный почтовый сервис и виртуальные машины, для которых важна высокая производительность;

- уровень 3 (Mid-Range) образуют массивы дисков, подключенных по интерфейсу SATA (Serial Advanced Technology Attachment) или NL-SAS (Near Line Serial Attached SCSI). Хранение характеризуется средней стоимостью и ограниченной функциональностью. Фактически, на данном уровне образуются файловые хранилища, для которых важны большие объемы и энергоэффективность;
- уровень 4 (Entry Level) образуют ленточные СХД, предназначенные для создания резервных копий и архивов: отдельные накопители, автозагрузчики, ленточные библиотеки. Хранение характеризуется низкой стоимостью и ограниченной функциональностью.

Таким образом, перед размещением данных каждой единице информации, подлежащей обработке и хранению, будем присваивать определенные метрики, устанавливающие требования к хранению [12–14]. В их числе степень доступности (скорость предоставления информации), важность (стоимость потери данных в случае аппаратного и программного сбоя), срок хранения и частота запроса. Метрики также возможно выделить из метаданных сохраняемых файлов. Одним из известных стандартов описания метаданных является Dublin Core Metadata Element Set (DCMES) — набор элементов метаданных для описания цифровых или физических ресурсов¹.

Множество файловых метрик будем подавать на вход контроллера нечеткой логики до самого процесса записи нового файла в СХД.

Структуру любого контроллера нечеткой логики составляют (рис. 2): блок фаззификации, блок функции принадлежности, лингвистическая модель, модуль нечеткого вывода и блок дефаззификации [15].

Фаззификация — процесс применения функции принадлежности для интерпретации точных значений переменных $x_1, x_2, ..., x_n$ в нечеткие множества $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, ..., \mathbf{z}_n$ лингвистической переменой.

Нечеткое множество определяется через базовую шкалу *В* переменной *x* и функцию принадлежности $\mu(x), x \in B$, принимающую значения на интервале [0, 1].

Лингвистическая переменная — набор характеристик некоторого свойства — термов. Например, лингвистическая переменная «Важность данных» задается нечетким множеством {«низкая», «средняя», «высокая»}, в котором каждый терм имеет следующий диапазон значений:

- «низкая» стоимость потери данных в случае аппаратного и программного сбоев не превысит 30 % активов компании;
- «средняя» не превысит 80 % активов компании;
- «высокая» превысит 80 % активов компании.

¹ ГОСТ Р 7.0.10–2019 (ИСО 15836-1:2017) Набор элементов метаданных «Дублинское ядро». Введен 01.01.2020. Национальный стандарт Российской Федерации. 11 с.



Рис. 1. Иерархическая модель системы хранения данных

Fig. 1. Hierarchical model of the storage system



Рис. 2. Структура контроллера нечеткой логики.

F — блок фаззификации; D — блок дефаззификации; X — множество входных переменных; у — результат дефаззификации

Fig. 2. The structure of the fuzzy logic controller.

F — fuzzification block; D — defuzzification block; X — set of input variables; y — result of defuzzification

Функция принадлежности — субъективная степень уверенности эксперта в том, что данное конкретное значение базовой шкалы соответствует определяемому нечеткому множеству [16].

Лингвистическая модель — совокупность нечетких предикатных правил вида [17]

Rule: If x is $\mu(x)$, Then y is $\mu(y)$,

где x — имя входной переменной; y — имя переменной вывода; μ — заданная функция принадлежности; If <...> — предпосылка правила; Then <...> — заключение правила.

Для каждого правила Rule_i, $i = \overline{1, n}$ вычисляется значение истинности α_i , $i = \overline{1, n}$ предпосылки и применяется к заключению, что приводит к формированию нечетких подмножеств для всех термов результирующей лингвистической переменной $Y = \{y_1, y_2, ..., y_k\}$ [18]. Формирование *i*-го нечеткого подмножества y_i , $i = \overline{1, k}$ выполняется применением операции нечеткой логики «И», согласно которой функция принадлежности выходной переменной μ_i «отсекается» по высоте, соответствующей значению α_i (рис. 3). Далее все нечеткие подмножества y_i , i = 1, k лингвистических переменных объединяются вместе, чтобы формировать итоговое нечеткой множество выходной переменной Y. Такое объединение называется композицией и для ее реализации используется операция нечеткой логики «ИЛИ».

Дефаззификация — процесс обратный интерпретации — четкого значения выходной переменной, например, определение центра тяжести итогового множества *У* или центроида площади:

$$y = \frac{\int\limits_{i=\min}^{i=\max} y_i \mu(y_i) dy_i}{\int\limits_{i=\min}^{i=\max} \mu(y_i) dy_i},$$
 (1)

где y_i — результат выходной лингвистической переменной Y; $\mu(y_i)$ — функция принадлежности нечеткого подмножества y_i после композиции; min и max — левая и правая границы интервала носителя нечеткого множества выходной переменной.



Рис. 3. Формирование лингвистической переменной нечеткого вывода: применением операции нечеткой логики И (*a*); применением операции нечеткой логики ИЛИ (*b*)

Fig. 3. Formation of a linguistic variable of fuzzy inference: using the fuzzy logic operation AND (*a*); using the fuzzy logic operation OR (*b*)

Результаты исследования

В определении уровня СХД для размещения нового файла участвуют следующие метрики:

- степень доступности, обозначим как нечеткое множество $z_1; z_1 = \{$ «низкая», «средняя», «высокая» $\};$
- важность данных z₂ = {«низкая», «средняя», «высокая»};

- срок хранения z₃ = {«малый», «средний», «большой»};
- частота запросов данных $z_4 = \{$ «низкая», «средний», «высокая» $\};$

Введем конечное число функций принадлежности (рис. 4).

Формирование функций принадлежности для фаззификации элементов множеств $\{z_i\}_{i=\overline{1,4}}$ позволяет осуществить переход к соответствующим нечетким множествам

$$\tilde{z}_i = \mu(z_i),$$

где \tilde{z}_i — нечеткие числа в интервале [0, 1], соответствующие оценкам *i*-й метрики *j*-го файла.

Логическую модель зададим правилом Мамдани:

$$\mu(L) = \max_{k=1,n} \{ \min[\mu_1(z_1)_k, \, \mu_2(z_2)_k, \, \mu_3(z_3)_k, \, \mu_4(z_4)_k] \},$$

где n — количество правил логической модели, $n = 3^4 = 81$ — четыре лингвистические переменные имеют по три терма.

Введем лингвистическую переменную L «уровень СХД», которая определяет результат контроллера нечеткой логики. $L = \{$ «Hi-End», «Upper Mid-Range», «Mid-Range», «Entry Level» $\}$. Значение L вычислим в результате дефаззификации выходного нечеткого множества методом центроида площади (1).

Выбор правила Мамдани из других возможных обоснован равнозначностью влияния метрических характеристик файлов на определение уровня СХД при записи нового файла.

Пусть, для 10 файлов контроллер нечеткой логики ищет оптимальный уровень СХД. В результате ме-



Рис. 4. Функции принадлежности метрических характеристик файлов: степень доступности (μ₁) (*a*); важность данных (μ₂) (*b*); срок хранения (μ₃) (*c*); частота запросов данных (μ₄) (*d*)

Fig. 4. Membership functions of metric characteristics of files: degree of accessibility $(\mu_1)(a)$; data importance $(\mu_2)(b)$; storage period $(\mu_3)(c)$; frequency of data requests $(\mu_4)(d)$

Номер файла	z ₁	<i>z</i> ₂	z ₃	z ₄
1	0,9	0,8	1	0,9
2	0,6	0,7	0,8	0,8
3	0,7	0,6	0,7	0,4
4	0,9	0,8	0,9	0,1
5	0,8	0,7	0,6	0,7
6	0,9	0,3	0,4	0,2
7	0,4	0,5	0,2	0,7
8	0,2	0,8	1	0,9
9	0,3	0,1	0,3	0,3
10	0,6	0,4	0,4	0,7

Таблица 1. Значения метрических характеристик файлов *Table 1.* Values of metric characteristics of files

трики файлов	соответствуют	данным,	приведенным в
табл. 1.			

Результаты нечеткого вывода для размещения файлов в СХД приведены в табл. 2.

С течением времени значения метрик файлов будут меняться согласно гауссовской кривой в связи с потерей актуальности данных. Исходя из этого, работа контроллера для уже размещенных в СХД файлов должна периодически запускаться в сроки, установленные администратором СХД. Таким образом, будет осуществляться миграция данных по уровням СХД.

Заключение

Предложен новый алгоритм размещения файлов по уровням системы хранения данных в соответствии с метриками, указывающими на требования к хранению. Доказано использование в качестве метрик: степень доступности запрашиваемых данных (скорость ее предоставления); важность сохраняемых данных (стоимость

Литература

- Боков С.И., Чупринов А.А. О роли обеспечения системы управления цифровой экономикой России на основе организации единого информационного пространства // Наноиндустрия. 2019.
 Т. 12. N S(89). С. 135–139. https://doi.org/10.22184/ NanoRus.2019.12.89.135.139
- Challawala S., Lakhatariya J., Mehta C., Patel K. MySQL 8 for Big Data: Effective Data Processing with MySQL 8, Hadoop, NoSQL APIs, and Other Big Data Tools. Packt Publishing, 2017. 226 p.
- Lakshmanan V., Tigani J. Google BigQuery: The Definitive Guide: Data Warehousing, Analytics, and Machine Learning at Scale. O'Reilly Media, 2019. 475 p.
- Сивов В.В., Богатырев В.А. Отказоустойчивый кластер хранилища данных для аналитических запросов в банковской сфере // Advanced Engineering Research (Rostov-on-Don). 2023. Т 23. № 1. С. 76–84. https://doi.org/10.23947/2687-1653-2023-23-1-76-84
- Татарникова Т.М., Архипцев Е.Д. Определение числа реплик распределенного хранения больших данных // Международная конференция по мягким вычислениям и измерениям. 2023. Т. 1. С. 305–308.
- Шевцов В.Ю., Абрамов В.С. Анализ современных систем хранения данных // НБИ технологии. 2019. Т. 13. № 1. С. 25–30. https:// doi.org/https://doi.org/10.15688/NBIT.jvolsu.2019.1.5

Номер файла	Центроид	Уровень хранения
1	0,9	Hi-End
2	0,725	Upper Mid-Range
3	0,6	Upper Mid-Range
4	0,675	Upper Mid-Range
5	0,7	Upper Mid-Range
6	0,45	Mid-Range
7	0,425	Mid-Range
8	0,5	Mid-Range
9	0,25	Entry Level
10	0,525	Upper Mid-Range

Таблица 2. Результаты фаззификации Table 2. Fuzzification results

их потери в случае аппаратного и программного сбоев); запрашиваемый срок хранения данных и частота запроса одних и тех же данных. Метрики также возможно выделять из метаданных сохраняемых файлов.

Алгоритм размещения файлов по уровням системы хранения данных фактически является контроллером нечеткой логики, правила работы которого позволяют принимать решение о размещении файла на соответствующий уровень системы хранения данных. Номер уровня системы хранения данных для конкретного файла вычисляется на основе комплексного показателя значений метрик файлов.

Показан пример работы контроллера нечеткой логики по размещению файлов по уровням системы хранения данных с раскрытием содержания структурных элементов контроллера: нечетких множеств, функций принадлежности и логической модели.

Алгоритм работы контроллера нечеткой логики может быть интегрирован в работу системы хранения данных до процесса записи нового файла.

References

- Bokov S.I., Chuprinov A.A. On the role of digital economy of Russia management system based on organizing a unified information space. *Nanoindustry*, 2019, vol. 12, no. S(89), pp. 135–139. (in Russian). https://doi.org/10.22184/NanoRus.2019.12.89.135.139
- Challawala S., Lakhatariya J., Mehta C., Patel K. MySQL 8 for Big Data: Effective Data Processing with MySQL 8, Hadoop, NoSQL APIs, and Other Big Data Tools. Packt Publishing, 2017, 226 p.
- Lakshmanan V., Tigani J. Google BigQuery: The Definitive Guide: Data Warehousing, Analytics, and Machine Learning at Scale. O'Reilly Media, 2019, 475 p.
- Sivov V.V., Bogatyrev V.A. Data warehouse failover cluster for analytical queries in banking. *Advanced Engineering Research* (*Rostov-on-Don*), 2023, vol. 23, no. 1, pp. 76–84. https://doi. org/10.23947/2687-1653-2023-23-1-76-84
- Tatarnikova T.M., Arkhiptsev E.D. Determine the number of distributed big data storage replicas. *International Conference on Soft Computing and Measurements*, 2023, vol. 1, pp. 305–308. (in Russian)
- Shevtsov V.Yu., Abramov E.S. The analysis of modern data storage systems. *NB1 technologies*, 2019, vol. 13, no. 1, pp. 25–30. (in Russian). https://doi.org/https://doi.org/10.15688/NB1T. jvolsu.2019.1.5

- Татарникова Т.М., Пойманова Е.Д. Методика дифференцированного наращивания емкости системы хранения данных с многоуровневой структурой // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2020. Т. 20. № 1. С. 66–73. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2020-20-1-66-73
- Information Storage and Management / 2nd ed. New Jersey: John Wiley & Sons Inc., 2016. 544 p.
- Попов С.Г., Фридман В.С. Обзор методов динамического распределения данных в распределенных системах управления базами данных // Информатика, телекоммуникации и управление. 2018. Т. 11. № 4. С. 82–107. https://doi.org/10.18721/JCSTCS.11407
- 10. Полищук Ю.В. Взаимосвязь ценности и старения информации при управлении большими техническими системами // Информационные технологии. 2019. Т. 25. № 6. С. 381–384. https://doi.org/10.17587/it.25.381-384
- Kish L.B., Granqvist C.G. Does information have mass? // Proceedings of the IEEE. 2013. V. 101. N 9. P. 1895–1899. https:// doi.org/10.1109/jproc.2013.2273720
- Svetov B.Ya., Tatarnikova T.M., Poymanova E.D. Storage scaling management model // Информационно-управляющие системы. 2020. № 5. С. 43–49. https://doi.org/10.31799/1684-8853-2020-5-43-49
- Богатырев В.А., Богатырев С.В., Богатырев А.В. Оценка готовности компьютерной системы к своевременному обслуживанию запросов при его совмещении с информационным восстановлением памяти после отказов // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23. № 3(145). С. 608–617. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-3-608-617
- Bogatyrev V.A., Bogatyrev S.V., Bogatyrev A.V. Reliability and timeliness of servicing requests in infocommunication systems, taking into account the physical and information recovery of redundant storage devices // Proc. of the 2022 International Conference on Information, Control, and Communication Technologies (ICCT). 2022. P. 1–4. https://doi.org/10.1109/icct56057.2022.9976800
- Шилкина С.В., Фокина Е.Н. Контроллер нечёткой логики в управлении технологическими процессами // Вестник Сибирского государственного автомобильно-дорожного университета. 2018. Т. 15. № 1. С. 106–114. https://doi.org/10.26518/2071-7296-2018-1-106-114
- 16. Савченко Д.В., Резникова К.М., Смышляева А.А. Нечеткая логика и нечеткие информационные технологии // Интернет-журнал «Отходы и ресурсы». 2021. Т. 8. № 1 [Электронный ресурс]. URL: https://resources.today/PDF/10ECOR121.pdf (дата обращения: 08.10.2023). https://doi.org/10.15862/10ECOR121
- Киселёва Э.А., Краева А.А., Савинова Ю.С. Обзор нечеткой логики в управлении // Международный журнал прикладных наук и технологий Integral. 2019. № 3. С. 59.
- Веретёхин А.В., Ячменева В.М. Оценка эколого-экономической безопасности промышленного предприятия с использованием инструментария нечеткой логики // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Экономические науки. 2017. Т. 10. № 3. С. 140–157. https://doi.org/10.18721/JE.10313

Авторы

Татарникова Татьяна Михайловна — доктор технических наук, профессор, профессор, Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, Санкт-Петербург, 197002, Российская Федерация; профессор, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197022, Российская Федерация, Sc 36715607400, http://orcid.org/0000-0002-6419-0072, tm-tatarn@yandex.ru

Архипцев Евгений Дмитриевич — аспирант, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197022, Российская Федерация, https://orcid.org/0009-0006-3001-953X, lokargenia@gmail. com

Статья поступила в редакцию 09.10.2023 Одобрена после рецензирования 06.11.2023 Принята к печати 28.11.2023

- Tatarnikova T.M., Poymanova E.D. Differentiated capacity extension method for system of data storage with multilevel structure. *Scientific* and *Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2020, vol. 20, no. 1, pp. 66–73. (in Russian). https://doi. org/10.17586/2226-1494-2020-20-1-66-73
- Information Storage and Management. 2nd ed. New Jersey, John Wiley & Sons Inc., 2016, 544 p.
- Popov S.G., Fridman V.S. Review of methods for dynamic distribution of data in distributed database management systems. *Computing, Telecommunications and Control*, 2018, vol. 11, no. 4, pp. 82–107. (in Russian). https://doi.org/10.18721/JCSTCS.11407
- Polishuk Yu.V. Relations between significance and aging of information when control big technical systems. *Information Technology*, 2019, vol. 25, no. 6, pp. 381–384. (in Russian). https:// doi.org/10.17587/it.25.381-384
- Kish L.B., Granqvist C.G. Does information have mass? *Proceedings* of the IEEE, 2013, vol. 101, no. 9, pp. 1895–1899. https://doi. org/10.1109/jproc.2013.2273720
- Svetov B.Ya., Tatarnikova T.M., Poymanova E.D. Storage scaling management model. *Information and Control Systems*, 2020, no. 5, pp. 43–49. (in Russian). https://doi.org/10.31799/1684-8853-2020-5-43-49
- Bogatyrev V.A., Bogatyrev S.V., Bogatyrev A.V. Assessment of the readiness of a computer system for timely servicing of requests when combined with information recovery of memory after failures. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 3(145), pp. 608–617. (in Russian). https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-3-608-617
- Bogatyrev V.A., Bogatyrev S.V., Bogatyrev A.V. Reliability and timeliness of servicing requests in infocommunication systems, taking into account the physical and information recovery of redundant storage devices. Proc. of the 2022 International Conference on Information, Control, and Communication Technologies (ICCT), 2022, pp. 1–4. https://doi.org/10.1109/icct56057.2022.9976800
- Shilkina S.V., Fokina E.N. The controller of fuzzy logic in the management of technological processes. *The Russian Automobile and Highway Industry Journal*, 2018, vol. 15, no. 1, pp. 106–114. (in Russian). https://doi.org/10.26518/2071-7296-2018-1-106-114
- Savchenko D.V., Reznikova K.M., Smyshlyaeva A.A. Fuzzy logic and fuzzy information technology. *Russian Journal of Resources, Conservation and Recycling*, 2021, vol. 8, no. 1. Available at: https:// resources.today/PDF/10ECOR121.pdf (accessed: 08.10.2023). (in Russian). https://doi.org/10.15862/10ECOR121
- 17. Kiseleva E.A., Kraeva A.A., Savinova Iu.S. Overview of fuzzy logic in management. *International journal of applied sciences and technology Integral*, 2019, no. 3, pp. 59. (in Russian)
- Veretyokhin A.V., Yachmenova V.M. Evaluation of ecological and economic safety of an industrial enterprise using fuzzy logic tools. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Economics*, 2017, vol. 10, no. 3, pp. 140–157. (in Russian). https://doi.org/10.18721/ JE.10313

Authors

Tatiana M. Tatarnikova — D.Sc., Full Professor, Saint Petersburg State University of Aerospace Instumentation, Saint Petersburg, 197002, Russian Federation; Professor, Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, 197022, Russian Federation, SC 36715607400, http://orcid.org/0000-0002-6419-0072, tm-tatarn@ yandex.ru

Evgeny D. Arkhiptsev — PhD Student, Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, 197022, Russian Federation, https://orcid.org/0009-0006-3001-953X, lokargenia@gmail.com

Received 09.10.2023 Approved after reviewing 06.11.2023 Accepted 28.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» VITMO

ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ И КОГНИТИВНЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND COGNITIVE INFORMATION TECHNOLOGIES

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1178-1186

Personalization of convolutional neural networks within the stress detection task using heart rate variability data

Maksim O. Dobrokhvalov^{1⊠}, Anton Yu. Filatov²

1,2 Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, 197022, Russian Federation

¹ night1337bot@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-0571-5836

² aifilatov@etu.ru, https://orcid.org/0000-0003-4298-8523

Abstract

Stress detection is an active area of research with important implications for personal, occupational, and social health. Most modern approaches use features computed from multiple sensor modalities, i.e., grouping different types of data from multiple sources for processing. These include electrocardiogram, electrodermal activity, electromyogram, skin temperature, respiration, accelerometer data, etc. Also, traditional machine learning algorithms (decision tree, discriminant analysis, support vector machine, etc.) or fully-connected neural networks are mostly used. Using these methods requires large amounts of data. Researchers are considering different approaches to personalization or generalization of models relative to subjects, namely subject-independent and subject-dependent (initially personal or adapted) models. The aim of the presented work is to develop a method for detecting stress based on heart rate variability data, taking into account the process of personalization of neural networks. The use of a convolutional neural network is proposed. The dependence of accuracy on the length of the input signal is studied. The dependence of accuracy on the data dimensionality reduction layer (one-dimensional convolutional layer, maximizing and averaging pooling) used in the network is also considered. The importance of personalizing models is demonstrated to significantly increase the accuracy of models of specific subjects. It is shown that the proposed method, based on 60 intervals between heartbeats, makes it possible to binary determine whether a person is under stress. Personalization allowed increasing the accuracy from 91.8 % to 98.9 ± 2.6 %. The F1-score value increased from 0.907 to 0.983 ± 0.038 . The proposed personalized networks can be used in systems for monitoring the functional state of a person. They can also be used as part of a system that grants or restricts access to private resources based on whether a person is currently at rest.

Keywords

stress detection, convolutional neural network, machine learning, heart rate variability, subject-dependent models

Acknowledgements

The article was prepared within the project "Methods of hybrid intelligence for building heterogeneous multi-agent systems with self-learning and self-organization" of the development program of St. Petersburg Electrotechnical University "LETI".

For citation: Dobrokhvalov M.O., Filatov A.Yu. Personalization of convolutional neural networks within the stress detection task using heart rate variability data. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1178–1186. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1178-1186

[©] Dobrokhvalov M.O., Filatov A.Yu., 2023

УДК 004.032.26

Персонализация сверточных нейронных сетей в задаче обнаружения стресса с использованием данных вариабельности сердечного ритма

Максим Олегович Доброхвалов¹⊠, Антон Юрьевич Филатов²

^{1,2} Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» имени В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197022, Российская Федерация

¹ night1337bot@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-0571-5836

² aifilatov@etu.ru, https://orcid.org/0000-0003-4298-8523

Аннотация

Введение. Обнаружение стресса является активной областью исследований с важными последствиями для личного, профессионального и социального здоровья человека. Большинство современных подходов используют признаки, вычисленные на основе нескольких сенсорных модальностей, т. е. группируют для обработки различные типы данных, полученные из нескольких источников. К ним относятся электрокардиограмма, кожно-гальваническая реакция, электромиограмма, температура кожи, дыхание, данные акселерометров и др. При этом чаще используются традиционные алгоритмы машинного обучения, такие как решающие деревья, дискриминантный анализ, метод опорных векторов и другие, а также полносвязные нейронные сети. Использование этих методов требует больших объемов данных. Исследователи рассматривают отличающиеся подходы к персонализации или общности моделей относительно субъектов, а именно субъекто-независимые и субъекто-зависимые (изначально персональные или адаптированные) модели. Целью представленной работы является разработка метода детектирования стресса на основе данных вариабельности сердечного ритма с учетом процесса персонализации нейронных сетей. Метод. Для решения поставленной задачи предложено применение сверточной нейронной сети. Исследована зависимость точности детектирования от длины входного сигнала. Рассмотрена зависимость точности от используемого в сети слоя уменьшения размерности данных (одномерный сверточный слой, максимизирующий и усредняющий пуллинги). Продемонстрирована важность персонализации моделей, для значительного увеличения точности детектирования для конкретных субъектов. Основные результаты. Показано, что предлагаемый метод на основании 60 интервалов между ударами сердца позволяет бинарно определить, находится ли человек в состоянии стресса. Персонализация сверточных нейронных сетей позволила повысить точность с 91,8 до 98,9 ± 2,6 %. Значение F1-меры повысилось с 0,907 до 0,983 ± 0,038. Обсуждение. Предложенные персонализированные сети могут применяться в системах мониторинга функционального состояния человека. Также могут быть использованы как часть системы, предоставляющей или ограничивающей доступ к приватным ресурсам на основании того, находится ли человек в состоянии покоя в данный момент.

Ключевые слова

детектирование стресса, сверточные нейронные сети, машинное обучение, вариабельность сердечного ритма, субъекто-зависимые модели

Благодарности

Работа подготовлена в рамках проекта «Методы гибридного интеллекта для построения гетерогенных многоагентных систем с самообучением и самоорганизацией» программы развития СПбГЭТУ «ЛЭТИ».

Ссылка для цитирования: Доброхвалов М.О., Филатов А.Ю. Персонализация сверточных нейронных сетей в задаче обнаружения стресса с использованием данных вариабельности сердечного ритма // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1178–1186 (на англ. яз.). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1178-1186

Introduction

Stress is the body's response to perceived physical or psychological threats [1] and it is defined as the transition from a calm state to an excited state, triggering a set of physiological responses [2]. Moreover, stress detection is important for many health problems, such as depression, anxiety, heart attacks and strokes [3]. Stress also affects a person's decision-making ability, attention span, learning and problem-solving ability [4]. Therefore, stress detection is an important task.

Various classical machine learning methods as well as neural networks are used in various studies to solve this problem. Also, various input data for stress detection are used from various data sensors, such as electrocardiogram (ECG), electrodermal activity (EDA), etc. This study proposes to use a convolutional neural network which receives a set of RR intervals (Heart Rate Variability (HRV)) as input data. In [5], the authors successfully applied personalization to EDA data. Based on that research, this paper examines the process of personalization of convolutional neural networks with HRV input data. Thus, the aim of the work is to develop a method for stress detection based on HRV data, taking into account the process of personalization of neural networks, as well as the implementation of this method. The proposed approach is competitive with other modern methods. The code used in the work is available¹.

Related works

Summary of review related works is presented in Table 1. Wearable Stress and Affect Detection (WESAD) is a commonly used dataset in related works (14 of 20) but also some studies use their own data. Among the works reviewed, ECG [2, 3, 6–13], EDA [2–6, 9, 11, 14–19] and

¹ Available at: https://github.com/Nightbot1448/human_ stress_detection (accessed: 10.01.2023).

Paper	Year	Dataset	Subjects	Data	Model	Accuracy, %	Window, s
[2]	2018	WESAD	15	ECG, EDA, BVP, Temp, Resp, EMG, ACC	kNN, DT, RF, LDA , AB	92.83	0.25, 5, 60
[3]	2020	WESAD	15	ECG, EDA, BVP, Temp, Resp, EMG, ACC	kNN, SVM, AB, FCN	95.21	1
[4]	2020	WESAD	15	EDA	kNN, SVM, RF	91.6	_
[5]	2021	WESAD	15	EDA	CNN	92.85	60
[6]	2022	WESAD	15	ECG, EDA, BVP, Temp, Resp, EMG, ACC	CNN using GAF	94.8	
[7]	2016	Other	42	ECG	C4.5 tree	79	180
[8]	2021	Other	20	ECG	CNN	83.5	10
[9]	2021	WESAD	15	ECG, EDA, BVP, Temp, Resp, EMG, ACC	CNN	97.75 ± 2.55	60
[9]	2021	WESAD	15	ECG	CNN	91.75 ± 9.73	60
[10]	2019	AffectiveROAD, Other	9, 17	ECG	FCN	90.19	10, 60
[11]	2021	WESAD	15	ECG, EDA, BVP, Temp, Resp, EMG, ACC	LR	85.71	60
[12]	2021	Other	27	ECG	kNN, SVM , FCN, RF, GB	83	30
[13]	2019	Other	20	ECG	CNN	82.7	10
[14]	2020	Other	20, 3	HR, EDA	CNN	82.5, 93.8	
[15]	2021	WESAD	15	EDA	sTree	95.8	4
[16]	2018	Other	58	HR, EDA, Resp	FCN	89.7	90
[17]	2020	WESAD	15	EDA, BVP, ACC, Temp	RF , DT, LR	96.68 ± 3.2	0.25
[18]	2020	Other	41	BVP	kNN, LDA, FCN	82	60
[19]	2021	WESAD	15	EDA	kNN, SVM , FCN, RF	87.5	60
[20]	2022	WESAD	15	BVP	FCN	99.04	300
[21]	2019	WESAD	15	Temp, BVP, HR	LDA, QDA, RF	87.4 ± 10.4	15, 30, 60, 90, 120

Table 1. Summary of reviewed related works

Blood Volume Pulse (BVP) [2, 3, 6, 9, 11, 17, 18, 20, 21] were most often used as data sources. Also other sources, such as respiration info (Resp) [2, 3, 6, 9, 11, 16], skin temperature (Temp) [2, 3, 6, 9, 11, 17, 21], electromyogram (EMG) [2, 3, 6, 9, 11], accelerometers info (ACC) [2, 3, 6, 9, 11] used in some research. It should be noted that in most cases many data sources are used when applying feature engineering [2, 3, 6, 18, 21]. Time and frequency domain of ECG, BVP and EDA are widely used in studies [2–4, 6, 7, 9, 10, 15, 16]. Some studies [2, 4, 5, 7, 8, 10, 12, 18–20] extract features from only one data source. And also there are few studies that use raw data (sometimes with applying filters but without feature extraction) [5, 9, 13, 17].

Accuracy metrics reported ranged between 79 % [7] and 99.04 % [20]. Half of the studies used neural networks. Convolutional Neural Networks (CNN) were used in 6 papers [5, 6, 8, 9, 13, 14], Fully Connected Networks (FCN) also were used in 7 studies [3, 10, 12, 16, 18–20]. Also different studies used machine learning methods.

Random Forest (RF) was used in [2, 4, 17, 21]. Support Vector Machines (SVM) were utilized in experiments [3, 4, 12, 19]. Linear Discriminant analysis (LDA) was used in [2, 18, 21]. AdaBoost classifier (AB) was utilized in [2, 3]. K-nearest neighbor's classifier (kNN) was used in [2–4, 12, 18, 19]. Tree-based classifiers (like Decision Tree (DT)) were utilized in [2, 3, 7 (C4.5 tree [22]), 15, 17]. Also Logistic Regression (LR) was used in [11, 17]. Indikawati and Winiarti [17] are the only ones who directly used the signal without feature extractions with the classical machine learning methods. Work [23] used convolutional and long short-term memory [24] neural networks for encoding signal with sequent passing to clustering algorithms.

Materials and Methods

Data and preprocessing. Many studies conducted in the field of stress detection use data collected by researchers independently. This study uses the WESAD dataset [2], which has also been used in many studies in recent years [3, 5, 8, 14, 17, 20, 21]. It is a public dataset containing ECG. RR intervals were calculated from the ECG using the heartpy python library¹. Data with stress

¹ Available at: https://python-heart-rate-analysis-toolkit. readthedocs.io/en/latest/ (accessed: 10.01.2023).

and resting state labels were taken from the dataset. The amusement state was omitted. Next, the RR interval is the interval between neighboring heart beats. The interval is the set of RR intervals used as input data.

Model. The convolutional neural network [14] has shown sufficiently high accuracy. Therefore, a 1D convolutional network architecture was chosen. The network architecture is a sequential use of the ConvX block (Fig. 1, a) and the dimension reduction layer. The ConvX block consists of a one-dimensional convolutional layer with kernel size 3, a batch normalization layer, and a ReLU activation layer. The network architecture for the interval length (input data) equal to 60 is shown in Fig. 1, b. One-dimensional convolution (kernel = 2, stride = 2), max pooling (kernel = 2) and averaging pooling (kernel = 2) were considered as dimensionality reduction blocks. The number of input layers for convolution layers or ConvX blocks is given in parentheses. The first ConvX block parameter (in) means that there may or may not be a layer in the input data containing the difference between consecutive RR intervals (numerical derivative). The architecture depends in part on the maximum interval length. The goal was to form an architecture where after each ConvX block a dimensionality reduction layer could be added (except the first and last). Thus, this architecture made it possible to obtain the required data dimension due to convolutional layers and dimensionality reduction layers (without using fully connected layers). The results of various modifications are presented in the following sections.

Results

This section presents a comparison of different modifications:

- using different interval (input data) lengths,
- choosing layers to reduce dimensionality,
- using numerical derivation.

This section also presents the impact of model personalization for subjects.

Modifications. All modifications of the convolutional neural network proposed in the research process were implemented within this study using the PyTorch framework¹. In all experiments, the CrossEntropy loss function was used, the ASGD optimizer (with default parameters) was used, the number of epochs was 50, and the batch size was 8.

The first study was the choice of interval size. Normal resting heart rates range from 60 to 100 bpm [28]. Therefore, the number of RR intervals is not equivalent to the number of seconds, but they can be mapped. 60 seconds is a widely used interval in review studies. It was decided to consider no more than 60 RR intervals with a step of 15. More than 60 RR intervals were not considered due to too long initialization. The slide of intervals was 5 RR intervals. Fig. 2 shows accuracy for different modifications of models depending on input interval length. It can be seen that for the lengths 15, 30, 45 there is a direct dependence of the accuracy. In the case of input interval length equal to



Fig. 1. Neural Network: ConvX block (a); architecture (b)

60, the accuracy for models without numerical derivative is increased. For models with numerical derivation, for the same input interval length, the accuracy decreases regardless of the method of dimensionality reduction. However, the accuracy for the interval length 60 with a max pooling layer is greater (92.16 %) than the accuracy of the other modifications.

As mentioned earlier, one-dimensional convolution layers, max and averaging poolings were considered as dimension reduction methods. Using convolution as a layer for dimension reduction shows the lowest accuracy (Fig. 2). If a numerical derivative was present in the input data, the network with the averaging pooling determined stress with higher accuracy in all cases except when the interval length was 15. If the numerical derivative was not used, then modifications with averaging and max pooling showed greater accuracy depending on the interval length. However the modification with the max pooling showed the highest accuracy (92.16 %) with interval length equal to 60.

The inclusion of an additional layer containing the difference of two consecutive RR intervals to the input data was considered. This value can be treated as a numerical derivative. This difference shows the dynamics of changes in RR intervals, which can be perceived as the rate of change in heart rate. For intervals of length 15, 30, and 45, the accuracy of the networks, whose input was additionally fed by the derivative, is higher than for the corresponding one but without this addition.

In the case of an interval length of 60, the accuracy of modifications without the numerical derivative is slightly higher than that with it. The largest difference between modifications with and without the numerical derivative



Fig. 2. Modifications accuracy

¹ Available at: https://pytorch.org/ (accessed: 13.01.2023).

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

Signal length	Numerical derivative	Reduce type	Accuracy, %	Balanced accuracy, %	Precision	Recall	F1-score	ROC AUC
45	_	avg	91.1	91.2	0.881	0.917	0.898	0.912
45	_	conv	90.3	90.2	0.883	0.892	0.888	0.902
45	_	max	90.5	90.0	0.915	0.859	0.886	0.900
45	+	avg	92.0	91.7	0.915	0.896	0.905	0.917
45	+	conv	91.5	91.0	0.925	0.874	0.899	0.910
45	+	max	91.8	91.4	0.919	0.886	0.902	0.914
60	_	avg	91.8	91.2	0.932	0.872	0.901	0.912
60	_	conv	91.4	90.8	0.93	0.866	0.897	0.908
60	_	max	92.2	91.8	0.922	0.893	0.907	0.918
60	+	avg	91.7	91.2	0.924	0.878	0.900	0.912
60	+	conv	91.2	90.8	0.908	0.883	0.895	0.908
60	+	max	91.4	91.2	0.905	0.894	0.900	0.912

Table 2. The metrics values of the modifications. The first three columns describe the modification type. The following ones are metrics values for this modification

is 1.2 % (modifications with the max pooling or with the convolutional layer, interval length 45).

Comparison of proposed modifications. This section presents a comparison of the metrics of the various proposed modifications (Table 2) when tested using all data (without skipping subjects).

The modification with interval length of 60, max pooling, and without numerical derivative has the highest accuracy, balanced accuracy, F1-score and ROC AUC (Area Under Receiver Operating Characteristic Curve) score. The modification with interval length 60, averaging pooling, and without numerical derivative has the highest precision score. The modification with interval length of 45, without the numerical derivative, and with the averaging pooling has the highest recall. Almost all modifications with signal length 60 differ from the best one by no more than 0.01 on F1-score. Thus, all modifications with signal length 60 were considered for personalization. For all modifications, the maximum accuracy was achieved after the 30th epoch. But 95 % of maximum accuracy had been achieved in the first 10 epochs because accuracy of some subjects reached near 100 %. And in the process of further training the accuracy of the rest of the subjects increased.

Models personalization. As stated earlier, each type of these models may have advantages and disadvantages. Subject-dependent models require a large amount of data.

Table 3. The accuracy of each subject's personalization, %. The first value in column header is the dimensionality reduction method used. The second is the use (Derivative) or omission (Default) of the numerical derivative

Subject	Avg, Derivative	Max, Derivative	Conv, Derivative	Avg, Default	Max, Default	Conv, Default
2	95.4	95.4	100.0	95.4	98.5	100.0
3	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
4	100.0	98.6	100.0	100.0	100.0	100.0
5	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
6	100.0	95.2	100.0	98.8	98.8	100.0
7	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	98.8
8	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
9	90.9	89.8	76.1	84.1	83.0	85.2
10	96.7	92.6	96.7	98.4	94.2	100.0
11	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
13	100.0	99.1	100.0	100.0	100.0	100.0
14	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
15	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	98.0
16	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
17	100.0	100.0	99.0	100.0	98.0	100.0
mean	98.87	98.05	98.12	98.45	98.16	98.8
std	2.61	3.27	6.14	4.16	4.48	3.8

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6
Subject	Accuracy before, %	Accuracy after, %	Accuracy delta, %	Balanced accuracy, %	Precision	Recall	F1-score	ROC AUC
2	68.2	95.4	27.3	93.2	1.0	0.864	0.927	0.932
3	74.3	100.0	25.7	100	1.0	1.0	1.0	1.0
4	100.0	100.0	0.0	100	1.0	1.0	1.0	1.0
5	56.6	100.0	43.4	100	1.0	1.0	1.0	1.0
6	100.0	100.0	0.0	100	1.0	1.0	1.0	1.0
7	60.7	100.0	39.3	100	1.0	1.0	1.0	1.0
8	90.0	100.0	10.0	100	1.0	1.0	1.0	1.0
9	54.6	90.9	36.4	88.6	0.926	0.806	0.862	0.886
10	43.0	96.7	53.7	95.8	1.0	0.917	0.957	0.958
11	97.3	100.0	2.7	100	1.0	1.0	1.0	1.0
13	100.0	100.0	0.0	100	1.0	1.0	1.0	1.0
14	97.2	100.0	2.7	100	1.0	1.0	1.0	1.0
15	91.8	100.0	8.2	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
16	100.0	100.0	0.0	100	1.0	1.0	1.0	1.0
17	76.0	100.0	24.0	100	1.0	1.0	1.0	1.0

Table 4. The accuracy of the best model before and after personalization. Other metrics of best model after personalization

General models are not taking into account the uniqueness of the subjects. So personalization may be a good solution. Another solution may be subjects grouping by similar patterns of intervals or, in a simpler version, with similar biological traits — gender, age, ethnicity, etc.

As stated previously, a personalization process was performed for all modifications with an interval length of 60. Table 3 presents accuracy after personalization for the modifications. The leave-one-subject-out (LOSO) approach [29] was used for personalization. For each subject, the following actions were performed:

- exclusion of the subject's training data from the total training dataset;
- CNN training;
- testing with the test data of the excluded subject;
- personalization of NN on the subject's training data;
- testing on subject test data.

In the process of personalization, the weights were adjusted not only for the predictor (the last convolutional layer in the network), but also for all other layers. Loss function, optimizer, count of epochs and size of batch was same with model modifications experiments (subsection

Paper	Method	Data	Accuracy, %
[2]	LDA	All Chest	92.83
[2]	LDA	ECG	85.44
[3]	MLP	All	95.21
[4]	kNN	EDA	91.60
[5]	CNN	EDA	90.00
[6]	CNN using GAF	All	94.80
[9]	CNN	All	97.75 ± 2.55
[9]	CNN	ECG	91.75 ± 9.73
[11]	Logistic regression-based classifier	HR	76.38
[15]	sTree	EDA	95.80
[17] (Subjects only)	RF	Wrist	96.68 ± 3.2
[19]	SVM	EDA	87.50
[20]	MLP	BVP	99.04
[21]	LDA	Skin Temp, BVP, HR	87.4 ± 10.4
Ours	CNN	ECG	91.80
Ours (personalized)	CNN	ECG	98.87 ± 2.61

Table 5. Accuracy of the proposed convolutional neural network and analogs on the WESAD dataset

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

"Modifications"). However, the highest accuracy for most subjects was obtained within 10 epochs. Sizes of subject datasets (amount of intervals) are in range [264, 487] (mean: 373.13, std: 63.20) for training sets and in range [66, 121] (mean: 92.67, std: 15.80) for test sets.

Based on Table 3, it can be concluded that the personalized models of all modifications, on average, give approximately the same result. The modification with numerical derivative and averaging pooling shows the highest accuracy (98.87 %) averaged over users. The difference in accuracy before and after model personalization is presented in Table 4. The table also presents other metrics values of the models after personalization.

Table 5 compares the accuracy of the proposed model with analogues. Based on the table, it can be concluded that the proposed network is competitive with analogs. It can be seen that the accuracy in [20] is higher. However, in that paper, various additional features were calculated as preprocessing, which is additional resource consumption. The proposed method avoids this action.

Conclusion

This research paper proposes a convolutional neural network for human mental stress detection. The input data

References

- 1. Selye H. The Stress of Life. 1956. New York, McGraw-Hill, 324 p.
- Schmidt P., Reiss A., Duerichen R., Marberger C., Van Laerhoven K. Introducing WESAD, a multimodal dataset for wearable stress and affect detection. *Proc. of the 20th ACM International Conference on Multimodal Interaction*, 2018, pp. 400–408. https://doi. org/10.1145/3242969.3242985
- Bobade P., Vani M. Stress detection with machine learning and deep learning using multimodal physiological data. *Proc. of the Second International Conference on Inventive Research in Computing Applications (ICIRCA)*, 2020, pp. 51–57. https://doi.org/10.1109/ icirca48905.2020.9183244
- Aqajari S.A.H., Naeini E.K., Mehrabadi M.A., Labbaf S., Rahmani A.M., Dutt N. GSR analysis for stress: Development and validation of an open source tool for noisy naturalistic GSR data. *arXiv*, 2020, arXiv:2005.01834. https://doi.org/10.48550/ arXiv.2005.01834
- Sah R.K., Ghasemzadeh H. Stress classification and personalization: Getting the most out of the least. *arXiv*, 2021, arXiv:2107.05666. https://doi.org/10.48550/arXiv.2107.05666
- Ghosh S., Kim S., Ijaz M.F., Singh P.K., Mahmud M. Classification of mental stress from wearable physiological sensors using imageencoding-based deep neural network. *Biosensors*, 2022, vol. 12, no. 12, pp. 1153. https://doi.org/10.3390/bios12121153
- Castaldo R., Xu W., Melillo P., Pecchia L., Santamaria L., James C. Detection of mental stress due to oral academic examination via ultrashort-term HRV analysis. *Proc. of the 38th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society* (*EMBC*), 2016, pp. 3805–3808. https://doi.org/10.1109/ embc.2016.7591557
- Dalal S., Khalaf O.I. Prediction of occupation stress by implementing convolutional neural network techniques. *Journal of Cases on Information Technology (JCIT)*, 2021, vol. 23, no. 3, pp. 27–42. https://doi.org/10.4018/jcit.20210701.oa3
- Lai K., Yanushkevich S.N., Shmerko V.P. Intelligent stress monitoring assistant for first responders. *IEEE Access*, 2021, vol. 9, pp. 25314– 25329. https://doi.org/10.1109/access.2021.3057578
- 10. Cho H.M., Park H., Dong S.Y., Youn I. Ambulatory and laboratory stress detection based on raw electrocardiogram signals using a

were sets of consecutive RR intervals of different lengths. These intervals were calculated from ECG data of the WESAD dataset. Different modifications of convolutional neural networks for the task of stress detection were also considered. The following modifications were considered: input signal length, layer used for dimension reduction (convolutional layer, averaging pooling and max pooling were considered), and use of numerical derivative calculated as difference between consequence RR intervals. This paper proposes initial training of the network on common data, followed by personalization of the model for each individual subject. The best model, which showed the highest average accuracy after personalization, is the network using averaging pooling, numerical derivation, and with an input length of 60. The accuracy of the model at the total given is as 91.7 %. The accuracy obtained after personalization is 98.87 $\% \pm 2.61$ %. It should be noted that when learning using LOSO, personalization made it possible to significantly increase the accuracy of the model for some subjects. This is because people, both at rest and under stress, can have different HRV values.

As further plans, the training of the proposed models in the problem of determining 3 classes is considered. Validation using the SWELL dataset is also considered. The use of other input data, such as EDA in combination with HRV, is considered as an area of research.

Литература

- 1. Selye H. The Stress of Life. 1956. New York: McGraw-Hill, 324 p.
- Schmidt P., Reiss A., Duerichen R., Marberger C., Van Laerhoven K. Introducing WESAD, a multimodal dataset for wearable stress and affect detection // Proc. of the 20th ACM International Conference on Multimodal Interaction. 2018. P. 400–408. https://doi. org/10.1145/3242969.3242985
- Bobade P., Vani M. Stress detection with machine learning and deep learning using multimodal physiological data // Proc. of the Second International Conference on Inventive Research in Computing Applications (ICIRCA). 2020. P. 51–57. https://doi.org/10.1109/ icirca48905.2020.9183244
- Aqajari S.A.H., Naeini E.K., Mehrabadi M.A., Labbaf S., Rahmani A.M., Dutt N. GSR analysis for stress: Development and validation of an open source tool for noisy naturalistic GSR data // arXiv. 2020. arXiv:2005.01834. https://doi.org/10.48550/ arXiv.2005.01834
- Sah R.K., Ghasemzadeh H. Stress classification and personalization: Getting the most out of the least // arXiv. 2021. arXiv:2107.05666. https://doi.org/10.48550/arXiv.2107.05666
- Ghosh S., Kim S., Ijaz M.F., Singh P.K., Mahmud M. Classification of mental stress from wearable physiological sensors using imageencoding-based deep neural network // Biosensors. 2022. V. 12. N 12. P. 1153. https://doi.org/10.3390/bios12121153
- Castaldo R., Xu W., Melillo P., Pecchia L., Santamaria L., James C. Detection of mental stress due to oral academic examination via ultrashort-term HRV analysis // Proc. of the 38th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC). 2016. P. 3805–3808. https://doi.org/10.1109/ embc.2016.7591557
- Dalal S., Khalaf O.I. Prediction of occupation stress by implementing convolutional neural network techniques // Journal of Cases on Information Technology (JCIT). 2021. V. 23. N 3. P. 27–42. https:// doi.org/10.4018/jcit.20210701.oa3
- Lai K., Yanushkevich S.N., Shmerko V.P. Intelligent stress monitoring assistant for first responders // IEEE Access. 2021. V. 9. P. 25314– 25329. https://doi.org/10.1109/access.2021.3057578
- 10. Cho H.M., Park H., Dong S.Y., Youn I. Ambulatory and laboratory stress detection based on raw electrocardiogram signals using a

convolutional neural network. *Sensors*, 2019, vol. 19, no. 20, pp. 4408. https://doi.org/10.3390/s19204408

- Iqbal T., Redon-Lurbe P., Simpkin A.J., Elahi A., Ganly S., Wijns W., Shahzad A. A sensitivity analysis of biophysiological responses of stress for wearable sensors in connected health. *IEEE Access*, 2021, vol. 9, pp. 93567–93579. https://doi.org/10.1109/access.2021.3082423
- Dalmeida K.M., Masala G.L. HRV features as viable physiological markers for stress detection using wearable devices. *Sensors*, 2021, vol. 21, no. 8, pp. 2873. https://doi.org/10.3390/s21082873
- He J., Li K., Liao X., Zhang P., Jiang N. Real-time detection of acute cognitive stress using a convolutional neural network from electrocardiographic signal. *IEEE Access*, 2019, vol. 7, pp. 42710– 42717. https://doi.org/10.1109/access.2019.2907076
- Woodward K., Kanjo E., Brown D.J., McGinnity T.M. On-device transfer learning for personalising psychological stress modelling using a convolutional neural network. *arXiv*, 2020, arXiv:2004.01603. https://doi.org/10.48550/arXiv.2004.01603
- Liapis A., Faliagka E., Katsanos C., Antonopoulos C., Voros N. Detection of subtle stress episodes during UX evaluation: Assessing the performance of the WESAD bio-signals dataset. *Lecture Notes in Computer Science*, 2021, vol. 12934, pp. 238–247. https://doi. org/10.1007/978-3-030-85613-7 17
- Al Abdi R.M., Alhitary A.E., Abdul Hay E.W., Al-Bashir A.K. Objective detection of chronic stress using physiological parameters. *Medical & Biological Engineering & Computing*, 2018, vol. 56, no. 12, pp. 2273–2286. https://doi.org/10.1007/s11517-018-1854-8
- Indikawati F.I., Winiarti S. Stress detection from multimodal wearable sensor data. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2020, vol. 771, no. 1, pp. 012028. https://doi. org/10.1088/1757-899x/771/1/012028
- Hantono B.S., Nugroho L.E., Santosa P.I. Mental stress detection via heart rate variability using machine learning. *International Journal on Electrical Engineering and Informatics*, 2020, vol. 12, no. 3, pp. 431–444. https://doi.org/10.15676/ijeei.2020.12.3.3
- Ninh V.T., Smyth S., Tran M.T., Gurrin C. Analysing the performance of stress detection models on consumer-grade wearable devices. *Frontiers in Artificial Intelligence and Applications*, 2021, vol. 337, pp. 524–537. https://doi.org/10.3233/faia210050
- Albaladejo-González M., Ruipérez-Valiente J.A., Gómez Mármol F. Evaluating different configurations of machine learning models and their transfer learning capabilities for stress detection using heart rate. *Journal of Ambient Intelligence and Humanized Computing*, 2023, vol. 14, no. 8, pp. 11011–11021. https://doi.org/10.1007/s12652-022-04365-z
- 21. Siirtola P. Continuous stress detection using the sensors of commercial smartwatch. Adjunct Proceedings of the 2019 ACM International Joint Conference on Pervasive and Ubiquitous Computing and Proceedings of the 2019 ACM International Symposium on Wearable Computers, 2019, pp. 1198–1201. https://doi.org/10.1145/3341162.3344831
- Quinlan J.R. C4.5: Programs for Machine Learning. Elsevier, 2014, 312 p.
- Oskooei A., Chau S.M., Weiss J., Sridhar A., Martínez M.R., Michel B. DeStress: deep learning for unsupervised identification of mental stress in firefighters from heart-rate variability (HRV) data. *Studies in Computational Intelligence*, 2021, vol. 194, pp. 93–105. https://doi.org/10.1007/978-3-030-53352-6_9
- Hochreiter S., Schmidhuber J. Long short-term memory. Neural Computation, 1997, vol. 9, no. 8, pp. 1735–1780. https://doi. org/10.1162/neco.1997.9.8.1735
- Xu Q., Nwe T.L., Guan C. Cluster-based analysis for personalized stress evaluation using physiological signals. *IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics*, 2015, vol. 19, no. 1, pp. 275–281. https://doi.org/10.1109/jbhi.2014.2311044
- Garcia-Ceja E., Brena R. Building personalized activity recognition models with scarce labeled data based on class similarities. *Lecture Notes in Computer Science*, 2015, vol. 9454, pp. 265–276. https://doi. org/10.1007/978-3-319-26401-1_25
- Lu H., Frauendorfer D., Rabbi M., Mast M.S., Chittaranjan G.T., Campbell A.T., Gatica-Perez D., Choudhury T. Stresssense: Detecting stress in unconstrained acoustic environments using smartphones. *Proc. of the 2012 ACM Conference on Ubiquitous Computing*, 2012, pp. 351–360. https://doi.org/10.1145/2370216.2370270
- Aladin A.I., Whelton S.P., Al-Mallah M.H., Blaha M.J., Keteyian S.J., Juraschek S.P., Rubin J., Brawner C.A., Michos E.D. Relation of resting heart rate to risk for all-cause mortality by gender after

convolutional neural network // Sensors. 2019. V. 19. N 20. P. 4408. https://doi.org/10.3390/s19204408

- Iqbal T., Redon-Lurbe P., Simpkin A.J., Elahi A., Ganly S., Wijns W., Shahzad A. A sensitivity analysis of biophysiological responses of stress for wearable sensors in connected health // IEEE Access. 2021. V. 9. P. 93567–93579. https://doi.org/10.1109/access.2021.3082423
- Dalmeida K.M., Masala G.L. HRV features as viable physiological markers for stress detection using wearable devices // Sensors. 2021. V. 21. N 8. P. 2873. https://doi.org/10.3390/s21082873
- He J., Li K., Liao X., Zhang P., Jiang N. Real-time detection of acute cognitive stress using a convolutional neural network from electrocardiographic signal // IEEE Access. 2019. V. 7. P. 42710– 42717. https://doi.org/10.1109/access.2019.2907076
- Woodward K., Kanjo E., Brown D.J., McGinnity T.M. On-device transfer learning for personalising psychological stress modelling using a convolutional neural network // arXiv. 2020. arXiv:2004.01603. https://doi.org/10.48550/arXiv.2004.01603
- Liapis A., Faliagka E., Katsanos C., Antonopoulos C., Voros N. Detection of subtle stress episodes during UX evaluation: Assessing the performance of the WESAD bio-signals dataset // Lecture Notes in Computer Science. 2021. V. 12934. P. 238–247. https://doi. org/10.1007/978-3-030-85613-7 17
- Al Abdi R.M., Alhitary A.E., Abdul Hay E.W., Al-Bashir A.K. Objective detection of chronic stress using physiological parameters // Medical & Biological Engineering & Computing. 2018. V. 56. N 12. P. 2273–2286. https://doi.org/10.1007/s11517-018-1854-8
- Indikawati F.I., Winiarti S. Stress detection from multimodal wearable sensor data // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. 2020. V. 771. N 1. P. 012028. https://doi. org/10.1088/1757-899x/771/1/012028
- Hantono B.S., Nugroho L.E., Santosa P.I. Mental stress detection via heart rate variability using machine learning // International Journal on Electrical Engineering and Informatics. 2020. V. 12. N 3. P. 431– 444. https://doi.org/10.15676/ijeei.2020.12.3.3
- Ninh V.T., Smyth S., Tran M.T., Gurrin C. Analysing the performance of stress detection models on consumer-grade wearable devices // Frontiers in Artificial Intelligence and Applications. 2021. V. 337. P. 524–537. https://doi.org/10.3233/faia210050
- Albaladejo-González M., Ruipérez-Valiente J.A., Gómez Mármol F. Evaluating different configurations of machine learning models and their transfer learning capabilities for stress detection using heart rate // Journal of Ambient Intelligence and Humanized Computing. 2023. V. 14. N 8. P. 11011–11021. https://doi.org/10.1007/s12652-022-04365-z
- 21. Siirtola P. Continuous stress detection using the sensors of commercial smartwatch // Adjunct Proceedings of the 2019 ACM International Joint Conference on Pervasive and Ubiquitous Computing and Proceedings of the 2019 ACM International Symposium on Wearable C o m p u t e r s. 2019. P. 1198-1201. https://doi.org/10.1145/3341162.3344831
- Quinlan J.R. C4.5: Programs for Machine Learning. Elsevier, 2014. 312 p.
- Oskooei A., Chau S.M., Weiss J., Sridhar A., Martínez M.R., Michel B. DeStress: deep learning for unsupervised identification of mental stress in firefighters from heart-rate variability (HRV) data // Studies in Computational Intelligence. 2021. V. 194. P. 93–105. https://doi.org/10.1007/978-3-030-53352-6_9
- Hochreiter S., Schmidhuber J. Long short-term memory // Neural Computation. 1997. V. 9. N 8. P. 1735–1780. https://doi.org/10.1162/ neco.1997.9.8.1735
- Xu Q., Nwe T.L., Guan C. Cluster-based analysis for personalized stress evaluation using physiological signals // IEEE Journal of Biomedical and Health Informatics. 2015. V. 19. N 1. P. 275–281. https://doi.org/10.1109/jbhi.2014.2311044
- Garcia-Ceja E., Brena R. Building personalized activity recognition models with scarce labeled data based on class similarities // Lecture Notes in Computer Science. 2015. V. 9454. P. 265–276. https://doi. org/10.1007/978-3-319-26401-1_25
- Lu H., Frauendorfer D., Rabbi M., Mast M.S., Chittaranjan G.T., Campbell A.T., Gatica-Perez D., Choudhury T. Stresssense: Detecting stress in unconstrained acoustic environments using smartphones // Proc. of the 2012 ACM Conference on Ubiquitous Computing. 2012. P. 351–360. https://doi.org/10.1145/2370216.2370270
- Aladin A.I., Whelton S.P., Al-Mallah M.H., Blaha M.J., Keteyian S.J., Juraschek S.P., Rubin J., Brawner C.A., Michos E.D. Relation of resting heart rate to risk for all-cause mortality by gender after

considering exercise capacity (the Henry Ford exercise testing project). *The American Journal of Cardiology*, 2014, vol. 114, no. 11, pp. 1701–1706. https://doi.org/10.1016/j.amjcard.2014.08.042

 Cawley G.C., Talbot N.L.C. Efficient leave-one-out cross-validation of kernel fisher discriminant classifiers. *Pattern Recognition*, 2003, vol. 36, no. 11, pp. 2585–2592. https://doi.org/10.1016/s0031-3203(03)00136-5

Authors

Maksim O. Dobrokhvalov — PhD Student, Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, 197022, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0002-0571-5836, night1337bot@gmail. com

Anton Yu. Filatov — PhD, Associate Professor, Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, 197022, Russian Federation, SC 57194078312, https://orcid.org/0000-0003-4298-8523, aifilatov@etu.ru

Received 19.05.2023 Approved after reviewing 31.10.2023 Accepted 22.11.2023



considering exercise capacity (the Henry Ford exercise testing project) // The American Journal of Cardiology. 2014. V. 114. N 11. P. 1701–1706. https://doi.org/10.1016/j.amjcard.2014.08.042

 Cawley G.C., Talbot N.L.C. Efficient leave-one-out cross-validation of kernel fisher discriminant classifiers // Pattern Recognition. 2003.
 V. 36. N 11. P. 2585–2592. https://doi.org/10.1016/s0031-3203(03)00136-5

Авторы

Доброхвалов Максим Олегович — аспирант, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» имени В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197022, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0002-0571-5836, night1337bot@gmail.com

Филатов Антон Юрьевич — кандидат технических наук, доцент, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» имени В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197022, Российская Федерация, sc 57194078312, https://orcid.org/0000-0003-4298-8523, aifilatov@etu.ru

Статья поступила в редакцию 19.05.2023 Одобрена после рецензирования 31.10.2023 Принята к печати 22.11.2023

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **VİTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1187-1197 УДК 004.048

Использование топологического анализа данных для построения байесовских нейронных сетей Александра Сергеевна Ватьян¹, Наталия Федоровна Гусарова^{2⊠}, Дмитрий Александрович Добренко³, Кристина Сергеевна Панкова⁴, Иван Вячеславович Томилов⁵

1,2,3,4,5 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ alexvatyan@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5483-716X

² natfed@list.ru^{\overline{1}}, https://orcid.org/0000-0002-1361-6037

³ enotpalaskun@gmail.com, https://orcid.org/0009-0006-1485-1166

⁴ pankovakrisss@gmail.com, https://orcid.org/0009-0002-0490-0148

⁵ ivan-tomilov3@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0003-1886-2867

Аннотация

Введение. Впервые предложен упрощенный подход к построению байесовских нейронных сетей, сочетающий вычислительную эффективность с возможностью анализа процесса обучения. Метод. Предлагаемый подход основан на байесианизации детерминированной нейронной сети посредством рандомизации параметров только на уровне интерфейса. Формирование байесовской нейронной сети на основе заданной сети осуществляется путем замены ее параметров на вероятностные распределения, которые имеют в качестве среднего значения параметры исходной модели. Оценки метрик эффективности нейронной сети, полученной в рамках рассматриваемого подхода, и байесовской нейронной сети, построенной посредством вариационного вывода, выполнены с использованием методов топологического анализа данных. Основные результаты. Процедура байесианизации реализована с помощью градуированного варьирования интенсивности рандомизации. В качестве альтернативы использованы две нейронные сети с идентичной структурой — детерминированная и классическая байесовская. На вход нейронной сети подавались исходные данные двух датасетов из медицинского домена в вариантах без зашумления и с добавленным гауссовским шумом. Рассчитаны нулевые и первые персистентные гомологии для эмбеддингов формируемых нейронных сетей на каждом из слоев. Для оценки качества классификации использована метрика точности (accuracy). Показано, что баркоды для эмбеддингов на каждом слое байесианизированной нейронной сети во всех четырех сценариях находятся между соответствующими баркодами детерминированной и байесовской нейронной сетей как для нулевых, так и для первых персистентных гомологий. При этом детерминированная нейронная сеть является нижней границей, а байесовская — верхней. Показано, что структура ассоциаций данных внутри байесианизированной нейронной сети наследуется от детерминированной модели, однако приобретает свойства байесовской. Экспериментально установлено наличие взаимосвязи между нормированной персистентной энтропией, вычисляемой на эмбеддингах нейронной сети, и точностью нейронной сети. Для предсказания точности наиболее показательной оказалась топология эмбеддингов на среднем слое модели нейронной сети. Обсуждение. Предлагаемый подход может быть использован для упрощения построения байесовской нейронной сети из уже обученной детерминированной нейронной сети. Это открывает возможности повышения точности существующей нейронной сети без ансамблирования с дополнительными классификаторами. Появляется возможность проактивной оценки эффективности формируемой нейронной сети на упрощенных данных без запуска на реальном датасете, что сокращает ресурсоемкость ее разработки.

Ключевые слова

байесовские нейронные сети, персистентная гомология, нормированная персистентная энтропия, эмбеддинг, баркод

Благодарности

Работа поддержана грантом Российского научного фонда 23-11-00346.

[©] Ватьян А.С., Гусарова Н.Ф., Добренко Д.А., Панкова К.С., Томилов И.В., 2023

Ссылка для цитирования: Ватьян А.С., Гусарова Н.Ф., Добренко Д.А., Панкова К.С., Томилов И.В. Использование топологического анализа данных для построения байесовских нейронных сетей // Научнотехнический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1187–1197. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1187-1197

Using topological data analysis for building Bayesan neural networks Alexandra S. Vatian¹, Natalia F. Gusarova²⊠, Dmitriy A. Dobrenko³, Kristina S. Pankova⁴, Ivan V. Tomilov⁵

1,2,3,4,5 ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ alexvatyan@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5483-716X

² natfed@list.ru^{\overline\$}, https://orcid.org/0000-0002-1361-6037

³ enotpalaskun@gmail.com, https://orcid.org/0009-0006-1485-1166

⁴ pankovakrisss@gmail.com, https://orcid.org/0009-0002-0490-0148

⁵ ivan-tomilov3@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0003-1886-2867

Abstract

For the first time, a simplified approach to constructing Bayesian neural networks is proposed, combining computational efficiency with the ability to analyze the learning process. The proposed approach is based on Bayesianization of a deterministic neural network by randomizing parameters only at the interface level, i.e., the formation of a Bayesian neural network based on a given network by replacing its parameters with probability distributions that have the parameters of the original model as the average value. Evaluations of the efficiency metrics of the neural network were obtained within the framework of the approach under consideration, and the Bayesian neural network constructed through variation inference were performed using topological data analysis methods. The Bayesianization procedure is implemented through graded variation of the randomization intensity. As an alternative, two neural networks with identical structure were used --- deterministic and classical Bayesian networks. The input of the neural network was supplied with the original data of two datasets in versions without noise and with added Gaussian noise. The zero and first persistent homologies for the embeddings of the formed neural networks on each layer were calculated. To assess the quality of classification, the accuracy metric was used. It is shown that the barcodes for embeddings on each layer of the Bayesianized neural network in all four scenarios are between the corresponding barcodes of the deterministic and Bayesian neural networks for both zero and first persistent homologies. In this case, the deterministic neural network is the lower bound, and the Bayesian neural network is the upper bound. It is shown that the structure of data associations within a Bayesianized neural network is inherited from a deterministic model, but acquires the properties of a Bayesian one. It has been experimentally established that there is a relationship between the normalized persistent entropy calculated on neural network embeddings and the accuracy of the neural network. For predicting accuracy, the topology of embeddings on the middle layer of the neural network model turned out to be the most revealing. The proposed approach can be used to simplify the construction of a Bayesian neural network from an already trained deterministic neural network, which opens up the possibility of increasing the accuracy of an existing neural network without ensemble with additional classifiers. It becomes possible to proactively evaluate the effectiveness of the generated neural network on simplified data without running it on a real dataset, which reduces the resource intensity of its development.

Keywords

Bayesian neural networks, persistent homology, normalized persistent entropy, embedding, barcode

Acknowledgements

The work is supported by Grant RSF 23-11-00346.

For citation: Vatian A.S., Gusarova N.F., Dobrenko D.A., Pankova K.S., Tomilov I.V. Using topological data analysis for building Bayesan neural networks. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1187–1197 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1187-1197

Введение

Байесовские нейронные сети (БНС) занимают важное место в ряду нейросетевых архитектур. Они строятся путем введения в обычную архитектуру нейронной сети (НС), воспроизводящей произвольную функцию $y = \Phi(x)$, стохастических компонентов, например, стохастической функции активации *s* или стохастического вектора параметров $\theta \sim p(\theta)$, т. е. параметр θ распределен по некоторому вероятностному закону $p(\theta)$. В результате функция Φ становится аппроксимацией значения у при наличии случайной шумовой компоненты є: $y = \Phi_{\theta}(x) + \varepsilon$.

Работу БНС можно рассматривать как моделирование нескольких возможных моделей θ с соответ-

ствующим распределением вероятностей $p(\theta)$, т. е. как частный случай ансамблевого обучения, при этом практически для любой детерминированной НС можно построить ее байесовский аналог. Так как агрегирование прогнозов большого набора независимых предикторов средней эффективности может привести к лучшим прогнозам, чем один высокоэффективный предиктор, то БНС могут обеспечить лучшую эффективность, а также принципиально являются более робастными по сравнению с детерминированными НС (с точечной оценкой).

Тем не менее, несмотря на явные достоинства, БНС пока не получили значительного распространения, что объясняется повышенной сложностью процедуры их обучения и настройки. Во-первых, в БНС кратно (по сравнению с соответствующим детерминированным аналогом) возрастает число настраиваемых гиперпараметров, а во-вторых, необходимо получить оценку не отдельного вектора параметров θ , а его распределения $p(\theta)$. В этих условиях упрощающие методы оценки $p(\theta)$, такие как сэмплирование методом Монте-Карло и вариационный вывод на базе типовых распределений, оказываются ресурсозатратными в плане времени и вычислительных мощностей. С другой стороны, стандартная процедура подбора гиперпараметров по сетке практически теряет сходимость, так как разработчик не имеет инструментария для отслеживания изменений внутреннего состояния БНС в ходе рандомизации.

В последние годы появились предложения использовать в качестве такого инструментария топологический анализ данных [1], в первую очередь аппарат персистентных гомологий (ПГ) [2]. ПГ позволяют эффективно вычислять и оценивать мультимасштабные топологические особенности вложенных семейств симплициальных комплексов и топологических пространств, характеризующих внутреннее состояние HC и его трансформации в ходе оценки функции $y = \Phi(x)$, и тем самым вывести HC из парадигмы «черного ящика». Однако известные работы (см. далее в разделе «Состояние проблемы») ограничиваются приложением аппарата ПГ только к детерминированным HC, в то время как переход к стохастическим HC и, в частности к БHC, остается вне поля зрения исследователей.

Таким образом, разработка подходов к построению БНС, сочетающих вычислительную эффективность с возможностью анализа процесса обучения, является актуальной задачей. В настоящей работе с этой целью предложен подход, основанный на байесианизации детерминированной НС посредством рандомизации параметров на уровне инференса. Под байесианизацией НС [3, 4] понимается формирование БНС на основе заданной НС путем замены параметров последней на вероятностные распределения, которые имеют в качестве среднего значения параметры исходной модели. Полученная в ходе этого процесса НС в работе называется байесианизированной НС. С использованием методов топологического анализа данных проведены оценки метрик эффективности НС, полученной в рамках рассматриваемого подхода, и БНС, построенной посредством вариационного вывода. Сравнение классических для НС метрик, а также метрик, основанных на вычислении ПГ, показало, что оба варианта НС обеспечивают сопоставимые показатели эффективности, при этом предложенный подход является менее ресурсозатратным по сравнению с вариационным выводом.

Состояние проблемы

Топологический анализ данных (ТАД) [1, 5, 6] представляет собою комплекс методов анализа топологических и геометрических структур, лежащих в основе данных, причем последние часто репрезентируются как облака точек в евклидовом или более общих метрических пространствах. В частности, ТАД — один из наиболее продвинутых средств изучения внутренней структуры признакового пространства НС [7–10].

Основными объектами в ТАД являются симплициальные комплексы. На рис. 1 схематично изображено построение симплициального комплекса Чеха [1]. Для этого вокруг каждой точки, принадлежащей облаку данных (рис. 1, a), строятся шары нарастающего радиуса ε (рис. 1, b). Пока ε мал, объединение всех ε -шаров состоит из непересекающихся ε -шаров. Если ε велик, то их объединение становится одним пространственным компонентом. Промежуточные значения ε позволяют проследить постепенную фильтрацию, т. е. объединение отдельных точек и формирование своего рода многомерной кластерной структуры данных.

ПГ позволяет рассматривать все значения є одновременно, обеспечивая тем самым единое представление топологических свойств облака данных. ПГ чаще всего графически представляется в виде диаграммы, называемой баркодом (рис. 2), содержащей отрезки, которые отвечают за время жизни свойств, соответствующих той или иной группе гомологий фильтрации $H_0, H_1, ...$ Каждый интервал баркода имеет начало t_{birth} , которое соответствует моменту появления определенной гомологии, и конец t_{death} , который соответствует моменту ее исчезновения. Гомологии могут иметь разные размер-







Рис. 2. Примеры баркода для групп гомологий $H_0(a)$ и $H_1(b)$. є — параметр фильтрации, N — номер гомологий в порядке рождения

Fig. 2. Example of a barcode: H_0 , H_1 — homology groups, ε — filtration parameter, N — homology number in birth order

ности. Так, нулевая группа гомологий H_0 описывает отсутствие путей между группами точек — каждая гомология в некотором смысле сигнализирует об отсутствии пути между конкретной парой кластеров. Первая группа гомологий H_1 описывает ситуации, когда между группами точек есть различные пути, которые нельзя деформировать друг в друга — ближайшим примером является окружность, между любыми двумя точками которой есть два варианта пути. Более многомерные группы гомологий описывают более абстрактные характеристики, которые можно описать как наличие *n*-мерной пустоты в пространстве. Таким образом, ПГ позволяют увидеть на разных масштабах наличие и отсутствие «многомерных дыр» в датасете в формате баркода.

Ранг *n*-ой группы гомологии симплициального комплекса называется числом Бетти b_n . В частности, b_0 характеризует число связанных компонентов, b_1 — число одномерных отверстий, и т. д.

Построение ПГ и вычисление чисел Бетти — наиболее широко применяемые приложения аппарата ТАД к анализу HC, при этом предметом анализа являются различные аспекты HC. В работе [11] изучена топология индуцированного графа, описывающего распространение вычислительного процесса от входа к выходу HC, в работах [12, 13] — топология границы раздела классификаторов на основе HC, в работах [14, 15] — топология эмбеддингов, которые HC формирует на отдельных слоях. Отметим, что последний подход представляется наиболее выразительным для описания трансформаций внутреннего пространства HC, поэтому в настоящей работе использован именно он.

Для количественной оценки топологических свойств НС используется постоянно расширяющийся ряд метрик, в том числе топологическая сложность (topological complexity) [12], нейронная устойчивость (neural persistence) [15], нейронное сшивание (neural stitching) и центрированное выравнивание ядра (centered kernel alignment) [16], и др. Однако анализ существующего спектра метрик показывает, что общепризнанный их набор в настоящее время отсутствует; они во многом являются проблемно-ориентированными, т. е. конструируются и применяются авторами в соответствии с конкретной решаемой задачей. В связи с этим в настоящей работе были опробованы 6 типов метрик, отражающих как общетопологические, так и информационные аспекты топологии анализируемых HC (топологии подробно охарактеризованы в следующем разделе «Материалы и методы»).

В большинстве рассмотренных работ изучены фактически топологические аспекты работы HC, главным образом — закономерности выполняемых ею топологических изменений [14, 17–20]. В то же время связь между топологическими характеристиками HC и ее типовыми метриками рассмотрены в единичных работах. Например, в работе [14] показана связь между точностью на тестовых данных (ассигасу) и временем жизни наиболее стойких одномерных гомологий пространственных фильтров первого слоя HC. В [17] получены оценки минимально достижимой ошибки обучения HC в зависимости от топологических характеристик входных данных и первых слоев полносвязных HC.

Следует отметить, что практически все найденные работы используют в качестве объекта изучения топологических свойств детерминированные полносвязные НС низкой размерности, значительно реже [15] рассматриваются детерминированные НС глубокого обучения. В то же время попыток топологического анализа стохастических НС в доступных авторам научных работах не обнаружено.

Байесианизация детерминированной НС как средство создания БНС основывается на предложенном в [3] методе индуцирующих весов, который позволяет заменить вариационный вывод в БНС на низкоразмерные аналоги реальных матриц весов. Его программная реализация представлена в открытом доступе в виде процедуры bayesianize в пакете РуТогсh, которая содержательно сводится к рандомизации параметров НС. Однако в большинстве известных работ [21] процедура bayesianize применяется на этапах обучения НС и ее применения (инференса). В этом случае полноценная байесианизация предобученных нейросетей крайне затруднена.

Таким образом, проведенный анализ научных работ подтверждает актуальность проблемы, рассматриваемой в настоящей работе, и позволяет сформулировать основные ее задачи:

- выявить и экспериментально оценить возможность упрощенного построения БНС путем рандомизации параметров уже обученной детерминированной НС только на уровне инференса;
- экспериментально оценить наличие связи между метриками ПГ, вычисляемыми на эмбеддингах НС, и эффективностью работы обученной НС на реальных датасетах;
- выделить метрику ПГ, вычисляемую на эмбеддингах НС, которая позволяет наиболее выразительно оценить эффективность работы обученной НС на реальных датасетах.

Материалы и методы

Рассмотрим три варианта НС:

- детерминированная НС полносвязная НС, для которой процессы обучения и инференса являются детерминированными;
- вариационная БНС БНС, полученная из детерминированной НС посредством вариационного вывода с параметрами, рандомизированными на основе мультипликативного шума Бернулли, причем рандомизация происходит как в процессе обучения, так и в процессе инференса; в качестве меры близости между используемой вариационной функцией и апостериорным распределением *p*(θ|*D*), где *D* тренировочные данные, используется дивергенция Кульбаха–Лейблера;
- байесианизированная НС–НС, полученная из детерминированной НС посредством рандомизации параметров на основе мультипликативного шума Бернулли, причем рандомизация происходит только в процессе инференса. В этом случае выполняется обучение детерминированной НС, но на этапе инференса к параметрам модели применяется мультипликативный шум типа Бернулли, который фактически реализует dropout за счет случайного обнуления некоторых параметров уже обученной сети. В результате формируется ансамбль глубоких нейронных сетей, который, по гипотезе авторов, можно рассматривать как БНС. Задачей работы является экспериментальное подтверждение этой гипотезы.

Для формирования байесианизированной HC предложена следующая процедура байесианизации: варьируем интенсивность рандомизации (параметр p в шуме Бернулли) градуировано от 0 до 1 до тех пор, пока выбранная метрика на основе ПГ не изменится на 10 % от изначальной величины (без рандомизации).

Структура исследуемых НС была выбрана идентичной (с точностью до параметризации) и послойно представлена на рис. 3. Слой Flatten переводит входное многомерное изображение в двумерное. Затем последовательно используются два линейных (Linear) слоя со стандартной функцией активации LeakyReLU, что увеличивает глубину сети и ее сложность.

Исследование проведено на следующих датасетах:

- СОVID-датасет набор данных¹, содержащий 3093 изображения, полученных с помощью рентгеновской томографии, которые были разделены на две категории: здоровые и больные COVID-19;
- FETUS-датасет набор данных², содержащий 2126 записей, каждая из которых содержит информацию о 21 свойстве, извлеченном из кардиотокограмм, классифицированными экспертами-акушерами на три категории: нормальный, подозрение на наличие патологии и патологический.



Puc. 3. Структура исследуемых нейронных сетей *Fig. 3.* Structure of the studied NN

Эксперименты выполнены по четырем сценариям. На всех трех сетях решалась задача классификации. На вход НС подавались COVID-датасет и FETUSдатасет без зашумления и с добавленным гауссовского шума соответственно. Были рассчитаны нулевые и первые ПГ для эмбеддингов, формируемых НС на каждом из трех слоев.

Для оценки качества классификации использована метрика точности (accuracy):

$$accuracy = \frac{TP + TN}{TP + FP + TN + FN},$$
 (1)

где ТР — true positive; FN — false negative; TN — true negative; FN — false negative.

Кроме того, для полносвязной HC из трех слоев рассчитаны следующие метрики для эмбеддингов на каждом из слоев:

максимальное время жизни гомологий:

$$max_len = max[death_i - birth_i];$$
 (2)

— среднее время жизни гомологий:

$$mean_len = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} [death_i - birth_i]; \qquad (3)$$

- стандартное отклонение времени жизни гомологий:

$$std_len = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left[[death_i - birth_i] - mean_len \right]^2}; \quad (4)$$

 отношение two to one наибольшего времени жизни гомологий:

$$two_to_one = \frac{second_max[death_i - birth_i]}{max[death_i - birth_i]};$$
(5)

— персистентная энтропия:

$$entropy = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i, p_i = \frac{death_i - birth_i}{\sum_{i=1}^{n} [death_i - birth_i]}; \quad (6)$$

нормированная персистентная энтропия:

$$normed_entropy = \frac{entropy}{\log\sum_{i=1}^{n} [death_i - birth_i]}.$$
 (7)

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

¹ [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www. kaggle.com/datasets/ahemateja19bec1025/covid-xray-dataset (дата обращения: 11.11.2023).

² [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www. kaggle.com/datasets/andrewmvd/fetal-health-classification (дата обращения: 11.11.2023).

Для оценки связи между метриками и значением ассигасу использован коэффициент корреляции Пирсона, оценивающий линейную связь между элементами,

$$\rho_{pearson}(\{x_i\}_{i=1}^n, \{y_i\}_{i=1}^n) = \frac{\sum\limits_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum\limits_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum\limits_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}, \quad (8)$$

а также коэффициент корреляции Спирмена, оценивающий взаимосвязь между рангами элементов в множестве $r(\cdot)$:

$$\rho_{spearman}(\{x_i\}_{i=1}^n, \{y_i\}_{i=1}^n) = \frac{\sum_{i=1}^n (r(x_i) - \overline{r(x)})(r(y_i) - \overline{r(y)})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (r(x_i) - \overline{r(x)})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (r(y_i) - \overline{r(y)})^2}}.$$
(9)

Результаты и обсуждение

На рис. 4, 5 и рис. 6, 7 в виде баркодов показаны результаты расчета нулевых (рис. 3–6, *a*) и первых (рис. 3–6, *b*) ПГ, полученные в соответствии с описанными сценариями в разделе «Материалы и методы».

Как видно из рис. 4–7, баркоды для эмбеддингов на каждом слое байесианизированной НС во всех четырех сценариях находится между соответствующими баркодами детерминированной и БНС как для нулевых, так и для первых ПГ, при этом детерминированная HC является нижней границей, а БHC — верхней. Это означает, что структура ассоциаций данных внутри байесианизированной HC наследуется от детерминированной модели, однако приобретает свойства БHC.

Также следует отдельно отметить явление, явно заметное при сравнении картин баркодов на рис. 4–7 для трех слоев и нулевых и первых ПГ: на слое 1 байесианизация оказывает минимальный эффект на топологию, и баркод эмбеддингов на нем значительно ближе к детерминированной НС; в то же время на слоях 2 и 3 соответственно баркоды эмбеддингов приближаются к некоторому среднему положению между детерминированной НС и БНС. Это означает, что процедура байесианизации оказывает наибольший эффект на высокоуровневые ассоциации, которые модель формирует на более глубоких слоях.

Было проведено исследование взаимосвязи между метриками для эмбеддингов на каждом из слоев (2)– (7) и значением точности (accuracy) классификации, достигаемой сетью на каждому из датасетов. Для этого были рассчитаны средние значения коэффициента корреляции Пирсона (8) и Спирмена (9), оцениваемые на основе данных обо всех трех слоях модели и двух датасетах. Результаты расчетов представлены в табл. 1. Из табл. 1 видно, что наиболее показательной оказалась нормированная персистентная энтропия (7).

На рис. 8, 9 приведены результаты вычисления метрики (7) для трех слоев байесианизированной модели с вариацией параметра байесианизации от 0,0 до 0,9 с шагом 0,1 на обоих датасетах (рис. 7, *a*, рис. 8, *a*). Для



Puc. 4. Персистентные гомологии для COVID-датасета: слои 1–3, $H_0(a)$ и $H_1(b)$ *Fig.* 4. Zero and first persistent homologies for the COVID dataset, layers 1–3, $H_0(a)$ и $H_1(b)$



Puc. 5. Персистентные гомологии для зашумленного COVID-датасета: слои 1–3, $H_0(a)$ и $H_1(b)$ *Fig. 5.* Zero and first persistent homologies for a noisy COVID dataset, layers 1–3, $H_0(a)$ и $H_1(b)$

наглядности на этих же рисунках приведены значения метрики точности (1), полученные в аналогичных условиях. Вертикальной красной линией отмечено минимальное значение параметра байесианизации, на котором падение метрики нормированной персистентной энтропии достигает 10 %.



Рис. 6. Персистентные гомологии для FETUS-датасета: слои 1–3, $H_0(a)$ и $H_1(b)$ *Fig. 6.* Zero and first persistent homologies for the FETUS dataset, layers 1–3, $H_0(a)$ и $H_1(b)$



Puc. 7. Персистентные гомологии для зашумленного FETUS-датасета: слои 1–3, $H_0(a)$ и $H_1(b)$ *Fig.* 7. Zero and first persistent homologies for a noisy FETUS dataset, layers 1–3, $H_0(a)$ и $H_1(b)$



Рис. 8. Изменение нормированной персистентной энтропии (*a*) и значения метрики точности (1) (*b*) с ростом интенсивности dropout для FETUS-датасета

Fig. 8. Change in normalized persistent entropy (*a*) and the value of the accuracy metric (1) (*b*) with increasing dropout intensity for the FETUS dataset



Рис. 9. Изменение нормированной персистентной энтропии (*a*) и значения метрики точности (1) (*b*) с ростом интенсивности dropout для COVID-датасета

Fig. 9. Change in normalized persistent entropy (*a*) and the value of the accuracy metric (1) (*b*) with increasing dropout intensity for the COVID dataset

Из рис. 8–9 видно, что в обоих случаях значение параметра, на котором персистентная энтропия на слое 2 HC падает на 10 % от изначальной величины, что является показательным для предсказания момента, на котором начинает наблюдаться резкое падение качества модели. Для слоев 1 и 3 эта величина оказывается менее выразительной.

Следует отдельно отметить, что на FETUS-датасете наблюдается неизменность величины энтропии на слое 1 — можно предположить, что это означает, что модель еще не выявила релевантной информации на данном слое.

Таблица 1. Взаимосвязь между метриками для персистентных гомологий, рассчитанных по эмбеддингам, и средним значением accuracy HC

Table 1. Relationship between metrics for persistent homologies calculated from embeddings and the average HC accuracy value

Метрика	Среднее значение (8) на всем промежутке масштабов	Среднее значение (9) на всем промежутке масштабов
(2)	0,04	0,190
(3)	0,10	0,170
(4)	-0,03	-0,060
(5)	0,07	0,153
(6)	-0,0001	-0,004
(7)	0,80	0,940

Для дополнительной оценки взаимосвязи между нормированной персистентной энтропией эмбеддингов на различных слоях для полученных данных были вычислены корреляция Пирсона (8) и корреляция Спирмена (9) (табл. 2, 3).

Данные табл. 2 и 3 подтверждают наличие взаимосвязи между нормированной персистентной энтропией, вычисляемой на эмбеддингах HC, и точностью HC. При этом взаимосвязь, вычисляемая в соответствии с ранговой корреляцией (9), оказалась идентичной для

Таблица 2. Значения метрик (8) и (9) для COVID-датасета *Table 2.* Values of metrics (8) and (9) for the COVID dataset

Номер слоя	Значения метрики (8)	Значения метрики (9)
1	0,902969	0,924016
2	0,939143	0,924016
3	0,882078	0,924016

Таблица 3. Значения метрик (8) и (9) для FETUS-датасета *Table 3.* Values of metrics (8) and (9) for the FETUS dataset

Номер слоя	Значения метрики (8)	Значения метрики (9)
1	0,412223	0,381257
2	0,800925	0,766929
3	0,667187	0,766929

всех трех слоев в COVID-датасете и для слоев 2 и 3 в FETUS-датасете. В то же время использование метрики (8), выявляющей степень более сильной, а именно, линейной взаимосвязи, выделяет топологию эмбеддингов на слое 2 модели как наиболее показательную для предсказания точности модели.

Сопоставляя полученные результаты (рис. 8, 9 и табл. 1, 2), можно предположить, что наиболее полезную информацию из структуры ассоциаций между эмбеддингами можно извлечь для слоев, близких к середине архитектуры, однако проверка этого предположения требует дополнительных исследований.

Заключение

В работе предложен упрощенный подход к построению байесовской нейронной сети, основанный на байесианизации уже обученной детерминированной нейронной сети посредством рандомизации параметров на уровне инференса, причем для рандомизации используется мультипликативный шум Бернулли, что фактически эквивалентно хорошо известной процедуре дропаута. Тем самым показана возможность практически для любой детерминированной нейронной сети построить ее байесовский аналог, что позволяет упростить процедуру обучения за счет уменьшения количества параметров.

Методы топологического анализа данных впервые применены к стохастическим нейронным сетям.

Литература

- Chazal F., Michel B. An introduction to topological data analysis: fundamental and practical aspects for data scientists // Frontiers in Artificial Intelligence. 2021. V. 4. https://doi.org/10.3389/ frai.2021.667963
- Edelsbrunner H., Harer J. Computational topology: an introduction. American Mathe-matical Soc., 2010 [Электронный ресурс]. URL: https://www.maths.ed.ac.uk/~v1ranick/papers/edelcomp.pdf (дата обращения: 10.11.2023).
- 3. Ritter H., Kukla M., Zhang C., Li Y. Sparse uncertainty representation in deep learning with inducing weights // Advances in Neural Information Processing Systems. 2021. V. 8. P. 6515–6528.
- Prabhudesai S., Hauth J., Guo D., Rao A., Banovic N., Huan X. Lowering the computational barrier: Partially Bayesian neural networks for transparency in medical imaging AI // Frontiers in Computer Science. 2023. V. 5. https://doi.org/10.3389/ fcomp.2023.1071174
- Zomorodian A., Carlsson G. Computing persistent homology // Discrete & Computational Geometry. 2005. V. 33. N 2. P. 249–274. https://doi.org/10.1007/s00454-004-1146-y
- Wasserman L. Topological data analysis // Annual Review of Statistics and Its Application. 2018. V. 5. P. 501–532. https://doi. org/10.1146/annurev-statistics-031017-100045
- Carlsson G., Gabrielsson R.B. Topological approaches to deep learning // Topological Data Analysis. Springer, 2020. P. 119–146. https://doi.org/10.1007/978-3-030-43408-3_5
- Hensel F., Moor M., Rieck B. A survey of topological machine learning methods // Frontiers in Artificial Intelligence. 2021. V. 4. https://doi.org/10.3389/frai.2021.681108
- Moroni D., Pascali M.A. Learning topology: bridging computational topology and machine learning // Pattern Recognition and Image Analysis. 2021. V. 31. N 3. P. 443–453. https://doi.org/10.1134/ S1054661821030184
- Zia A., Khamis A., Nichols J., Hayder Z., Rolland V., Peterssonet L. Topological deep learning: A review of an emerging paradigm //

Исследованы различные метрики, основанные на вычислении персистентных гомологий на эмбеддингах нейронных сетях, и их связь с базовыми метриками эффективности нейронной сети; выявлено, что расчет изменений нормированной персистентной энтропии позволяет с высокой точностью предсказать предельно допустимое значение уровня дропаута, с которого начинается резкое падение качества модели. Тем самым появляется возможность проактивно оценить эффективность байесовской нейронной сети на упрощенных датасетах, без запуска нейронной сети на реальном датасете, что сокращает ресурсоемкость разработки байесовской нейронной сети.

Сопоставление полученных результатов дает основания предполагать, что с ростом глубины модели баланс между наследуемостью ассоциаций от детерминированной модели и приобретением свойств байесовской модели будет выравниваться, однако это предположение требует дальнейших исследований.

В качестве направления дальнейших исследований авторы выделяют переход к более глубоким, в том числе сверточным нейронным сетям. В рамках этого перехода предполагается исследовать динамику баланса между наследуемостью ассоциаций от детерминированной модели и приобретением свойств байесовской моделей, а также позиционирование изменений в структуре ассоциаций между эмбеддингами соседних слоев, наиболее важных с точки зрения предсказания свойств нейронной сети как классификатора в целом.

References

- Chazal F., Michel B. An introduction to topological data analysis: fundamental and practical aspects for data scientists. *Frontiers in Artificial Intelligence*, 2021, vol. 4. https://doi.org/10.3389/ frai.2021.667963
- Edelsbrunner H., Harer J. Computational topology: an introduction. American Mathe-matical Soc., 2010. Available at: https://www.maths. ed.ac.uk/~v1ranick/papers/edelcomp.pdf (accessed: 10.11.2023).
- Ritter H., Kukla M., Zhang C., Li Y. Sparse uncertainty representation in deep learning with inducing weights. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2021, vol. 8, pp. 6515–6528.
- Prabhudesai S., Hauth J., Guo D., Rao A., Banovic N., Huan X. Lowering the computational barrier: Partially Bayesian neural networks for transparency in medical imaging AI. *Frontiers in Computer Science*, 2023, vol. 5. https://doi.org/10.3389/ fcomp.2023.1071174
- Zomorodian A., Carlsson G. Computing persistent homology. *Discrete & Computational Geometry*, 2005, vol. 33, no. 2, pp. 249– 274. https://doi.org/10.1007/s00454-004-1146-y
- Wasserman L. Topological data analysis. Annual Review of Statistics and Its Application, 2018, vol. 5, pp. 501–532. https://doi. org/10.1146/annurev-statistics-031017-100045
- Carlsson G., Gabrielsson R.B. Topological approaches to deep learning. *Topological Data Analysis*. Springer, 2020, pp. 119–146. https://doi.org/10.1007/978-3-030-43408-3_5
- Hensel F., Moor M., Rieck B. A survey of topological machine learning methods. *Frontiers in Artificial Intelligence*, 2021, vol. 4. https://doi.org/10.3389/frai.2021.681108
- Moroni D., Pascali M.A. Learning topology: bridging computational topology and machine learning. *Pattern Recognition and Image Analysis*, 2021, vol. 31, no. 3, pp. 443–453. https://doi.org/10.1134/ S1054661821030184
- Zia A., Khamis A., Nichols J., Hayder Z., Rolland V., Peterssonet L. Topological deep learning: A review of an emerging paradigm. *arXiv*, arXiv:2302.03836v1, 2023. https://doi.org/10.48550/ arXiv.2302.03836

arXiv. arXiv:2302.03836v1. 2023. https://doi.org/10.48550/ arXiv.2302.03836

- Goibert M., Ricatte T., Dohmatob E. An adversarial robustness perspective on the topology of neural networks // arXiv. 2022. arXiv:2211.02675. https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.02675
- Chen C., Ni X., Bai Q., Wang Y. A topological regularizer for classifiers via persistent homology // Proc. of the AISTATS 2019 — 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. 2020.
- Ramamurthy K.N., Varshney K.R., Mody K. Topological data analysis of decision boundaries with application to model selection // Proc. of the 36th International Conference on Machine Learning (ICML). 2019. P. 9316–9325.
- Gabrielsson R.B., Carlsson G. Exposition and interpretation of the topology of neural networks // Proc. of the 18th IEEE International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA). 2019. P. 1069–1076.
- Rieck B., Togninalli M., Bock C., Moor M., Horn M., Gumbsch T., Borwardt K. Neural persistence: A complexity measure for deep neural networks using algebraic topology // Proc. of the 7th International Conference on Learning Representations (ICLR). 2019.
- McGuire S., Jackson S., Emerson T., Kvinge H. Do neural networks trained with topological features learn different internal representations? // Proceedings of Machine Learning Research. 2023. V. 197. P. 122–136.
- Guss W.H., Salakhutdinov R. On characterizing the capacity of neural networks using algebraic topology // arXiv. 2018. arXiv:1802.04443v1. https://doi.org/10.48550/arXiv.1802.04443
- Bergomi M.G., Frosini P., Giorgi D., Quercioli N. Towards a topological–geometrical theory of group equivariant non-expansive operators for data analysis and machine learning // Nature Machine Intelligence. 2019. V. 1. N 9. P. 423–433. https://doi.org/10.1038/ s42256-019-0087-3
- Hofer C.D., Graf F., Niethammer M., Kwitt R. Topologically densified distributions // Proc. of the 37th International Conference on Machine Learning (ICML). 2020. P. 4254–4263.
- Naitzat G., Zhitnikov A., Lim L.-H. Topology of deep neural networks // The Journal of Machine Learning Research. 2020. V. 21. N 1. P. 7503–7542.
- Gal Y., Ghahramani Z. Dropout as a Bayesian approximation: Representing model uncertainty in deep learning // Proc. of the 33rd International Conference on Machine Learning (ICML). 2016. P. 1651–1660.

Авторы

Ватьян Александра Сергеевна — кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, вс 57191870868, https://orcid.org/0000-0002-5483-716X, alexvatyan@gmail.com

Гусарова Наталия Федоровна — кандидат технических наук, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, SC 57162764200, https://orcid.org/0000-0002-1361-6037, natfed@list.ru

Добренко Дмитрий Александрович — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid. org/0009-0006-1485-1166, enotpalaskun@gmail.com

Панкова Кристина Сергеевна — студент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid. org/0009-0002-0490-0148, pankovakrisss@gmail.com

Томилов Иван Вячеславович — старший лаборант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, sc 57772599000, https://orcid.org/0000-0003-1886-2867, ivantomilov3@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 26.10.2023 Одобрена после рецензирования 10.11.2023 Принята к печати 27.11.2023



- 11. Goibert M., Ricatte T., Dohmatob E. An adversarial robustness perspective on the topology of neural networks. *arXiv*, 2022, arXiv:2211.02675. https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.02675
- Chen C., Ni X., Bai Q., Wang Y. A topological regularizer for classifiers via persistent homology. *Proc. of the AISTATS 2019 – 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, 2020.
- Ramamurthy K.N., Varshney K.R., Mody K. Topological data analysis of decision boundaries with application to model selection. *Proc. of the 36th International Conference on Machine Learning* (*ICML*), 2019, pp. 9316–9325.
- Gabrielsson R.B., Carlsson G. Exposition and interpretation of the topology of neural networks. *Proc. of the 18th IEEE International Conference on Machine Learning and Applications (ICMLA)*, 2019, pp. 1069–1076.
- Rieck B., Togninalli M., Bock C., Moor M., Horn M., Gumbsch T., Borwardt K. Neural persistence: A complexity measure for deep neural networks using algebraic topology. *Proc. of the 7th International Conference on Learning Representations (ICLR)*, 2019.
- McGuire S., Jackson S., Emerson T., Kvinge H. Do neural networks trained with topological features learn different internal representations? *Proceedings of Machine Learning Research*, 2023, vol. 197, pp. 122–136.
- Guss W.H., Salakhutdinov R. On characterizing the capacity of neural networks using algebraic topology. *arXiv*, 2018, arXiv:1802.04443v1. https://doi.org/10.48550/arXiv.1802.04443
- Bergomi M.G., Frosini P., Giorgi D., Quercioli N. Towards a topological–geometrical theory of group equivariant non-expansive operators for data analysis and machine learning. *Nature Machine Intelligence*, 2019, vol. 1, no. 9, pp. 423–433. https://doi.org/10.1038/ s42256-019-0087-3
- Hofer C.D., Graf F., Niethammer M., Kwitt R. Topologically densified distributions. *Proc. of the 37th International Conference on Machine Learning (ICML)*, 2020, pp. 4254–4263.
- Naitzat G., Zhitnikov A., Lim L.-H. Topology of deep neural networks. *The Journal of Machine Learning Research*, 2020, vol. 21, no. 1, pp. 7503–7542.
- Gal Y., Ghahramani Z. Dropout as a Bayesian Approximation: Representing Model Uncertainty in Deep Learning. *Proc. of the 33rd International Conference on Machine Learning (ICML)*, 2016, pp. 1651–1660.

Authors

Alexandra S. Vatian — PhD, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, sc 57191870868, https:// orcid.org/0000-0002-5483-716X, alexvatyan@gmail.com

Natalia F. Gusarova — PhD, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, sc 57162764200, https://orcid.org/0000-0002-1361-6037, natfed@list.ru

Dmitriy A. Dobrenko — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0009-0006-1485-1166, enotpalaskun@gmail.com

Kristina S. Pankova — Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0009-0002-0490-0148, pankovakrisss@gmail.com

Ivan V. Tomilov — Senior Laboratory Assistant, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, sc 57772599000, https://orcid. org/0000-0003-1886-2867, ivan-tomilov3@yandex.ru

Received 26.10.2023 Approved after reviewing 10.11.2023 Accepted 27.11.2023

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ MODELING AND SIMULATION

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1198-1204 УДК 539.378:677.494

Метод моделирования вязкоупругих свойств ориентированных полимерных материалов с помощью многобарьерной теории

Виктория Владимировна Головина¹, Павел Павлович Рымкевич²

1,2 Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация

¹ victoria gol@mail.ru^{\overline\$}, https://orcid.org/0000-0002-2691-7680

² romallaa@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-9362-0561

Аннотация

Введение. Представлены результаты моделирования процессов деформирования одноосно ориентированных полимерных материалов. Приведено описание двухбарьерной модели, согласно которой макромолекулы полимера могут находиться в трех устойчивых состояниях. Получено определяющее уравнение ориентированного полимерного материала. Приведено решение полученного уравнения для случая режима деформирования с постоянным уровнем нагрузки. Метод. На основании теории энергетических барьеров в результате преобразования уравнений баланса чисел заполнения устойчивых состояний получено определяющее уравнение полимерного материала. Уравнение представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка по времени. Для процесса деформирования с постоянным уровнем нагрузки определяющее уравнение принимает вид линейного неоднородного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами. Для рассматриваемого случая приведено общее решение определяющего уравнения с помощью задачи Коши. Анализ и преобразование общего решения уравнения привели к зависимостям, определяющим деформацию ориентированного полимерного материала для процессов ползучести и восстановления. Основные результаты. Использование двухбарьерной модели с тремя устойчивыми состояниями макромолекул позволило получить определяющее уравнение, которое является дифференциальным уравнением второго порядка по времени. В качестве примера рассмотрено применение определяющего уравнения к режиму деформирования с постоянным уровнем нагрузки и получено его общее решение. Введена универсальная функция, с помощью которой можно рассчитать деформацию полимерного материала в режиме ползучести и восстановления. Путем совмещения теоретической кривой с экспериментальными кривыми ползучести нити из полиэтилентерефталата показана применимость рассмотренного метода моделирования. Обсуждение. Полученное определяющее уравнение дает возможность описывать и прогнозировать как статические, так и динамические режимы деформирования. Показана применимость полученной модели к статическому режиму деформирования. Замечено, что решение полученного определяющего уравнения в определенных случаях приводит к колебательному режиму релаксации.

Ключевые слова

теория энергетических барьеров, двухбарьерная модель, энергетическая диаграмма, высокоэластическая деформация, определяющее уравнение, ориентированные полимерные материалы

Ссылка для цитирования: Головина В.В., Рымкевич П.П. Метод моделирования вязкоупругих свойств ориентированных полимерных материалов с помощью многобарьерной теории // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1198–1204. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1198-1204

Method of modeling viscoelastic properties of oriented polymer materials using multi-barrier theory

Victoria V. Golovina¹⊠, Pavel P. Rymkevich²

1,2 Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation

¹ victoria gol@mail.ru[⊠], https://orcid.org/0000-0002-2691-7680

² romallaa@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0002-9362-0561

© Головина В.В., Рымкевич П.П., 2023

Abstract

The results of modeling deformation processes of uniaxially oriented polymer materials are presented. The discription of two-barrier model is given, according to which polymer macromolecules can be in three stable states. The constitutive equation of the oriented polymer material is obtained. The solution of this equation is shown for the case of a deformation mode with a constant load level. Based on the energy barriers theory, as a result of the transformation of the balance equations of the occupation numbers of steady states, the constitutive equation of the polymer material is obtained. This equation is a second-order differential equation in time. For the deformation process with a constant stress level, the constitutive equation takes the form of a linear inhomogeneous second-order differential equation with constant coefficients. A general solution of this equation is given in explicit form. The solution of the Cauchy problem gives a general solution of the constitutive equation for the considered case. The analysis and transformation of the general solution leads to dependencies that determine the deformation of the oriented polymer material for creep and recovery processes. The use of a two-barrier model with three steady states of macromolecules made it possible to obtain a constitutive equation which is a second-order differential equation in time. As an example, the application of the constitutive equation to the deformation mode with a constant stress level is considered and its general solution is obtained. A universal function has been introduced with the help of which it is possible to calculate the deformation of a polymer material in the creep and recovery mode. By combining the theoretical curve with the experimental creep curves of polyethylene terephthalate filaments, the applicability of the considered modeling method is shown. The obtained constitutive equation makes it possible to describe and predict both static and dynamic deformation modes. The applicability of the obtained model to the static mode of deformation is shown. It should be noted that the solution of the obtained constitutive equation in certain cases leads to an oscillatory relaxation mode.

Keywords

energy barrier theory, two-barrier model, energy diagram, highly elastic deformation, constitutive equation, oriented polymers

For citation: Golovina V.V., Rymkevich P.P. Method of modeling viscoelastic properties of oriented polymer materials using multi-barrier theory. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1198–1204 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1198-1204

Введение

Настоящая работа является продолжением исследования вопросов моделирования процессов деформирования полимерных материалов.

Полимерные материалы и изготовленные на их основе изделия имеют широкую область применения благодаря своим уникальным свойствам. Уникальность и разнообразие свойств полимерных материалов обусловлена особенностями молекулярного и надмолекулярного строений [1–7]. Отметим, что наилучшими прочностными характеристиками обладают синтетические полимерные материалы, которые находятся в ориентированном состоянии, определенным расположением основной структурной единицы — макромолекулы — преимущественно вдоль одного направления. При этом макромолекула имеет возможность принимать бесконечно большое число «мгновенных» конформаций, которые изменяются только за счет внутреннего теплового движения. Также изменение конформаций может происходить под влиянием внешних воздействий, не превышающих пределов, за которыми следует разрушение химических связей. Именно способность макромолекул изменять свою конформацию определяет релаксационный характер механического поведения полимеров, а это, в свою очередь, создает определенные трудности при решении задач моделирования и прогнозирования деформационных процессов в полимерных материалах. Математические модели, используемые для описания поведения данного класса материалов [8-13], приводят к определяющему уравнению первого порядка. С помощью такого уравнения не всегда возможно описать все многообразие наблюдаемых в полимерах эффектов.

Согласно барьерной теории вязкоупругости [14–16] поведение ориентированных полимеров, находящихся

в напряженно-деформированном состоянии, определяется количеством переходов через различные по высоте и ширине потенциальные барьеры. Однако, описанные ранее в рамках барьерной теории модели с двумя устойчивыми состояниями [14–17], также приводят к уравнению первого порядка. Введение дополнительных энергетических барьеров дает возможность более точно описать механическое поведение ориентированных полимерных материалов. Исходя из этого, интерес представляет модель, которая имеет более двух устойчивых состояний.

Цель работы — на основании теории энергетических барьеров, рассматривая модель, имеющую не менее трех устойчивых состояний, получить определяющее уравнение ориентированного полимерного материала.

Описание модели

Для моделирования деформационных процессов ориентированных полимерных материалов с учетом их релаксационной природы рассмотрим физическую модель с двумя энергетическими барьерами (рис. 1). Данная модель определяет, что группы макромолекул (кластеры) могут находиться в трех устойчивых состояниях, разделенных потенциальными барьерами высотой *H* и энергетическими зазорами *U*.

В отсутствие внешней нагрузки устойчивыми состояниями являются точки на диаграмме (рис. 1) с количеством групп (кластеров) макромолекул на единицу длины m_1^0 , m_2^0 и m_3^0 . Под действием внешней нагрузки в аморфных прослойках ориентированного полимерного материала происходит так называемая вынужденная ориентация макромолекул. Кластеры переходят из одного устойчивого состояния в другое, высвобождая или поглощая квант деформации δ. В результате под



Рис. 1. Энергетическая диаграмма макромолекул в зависимости от размера кластера *х*

Fig. 1. Energy diagram of macromolecules vs. the cluster size x

действием нагрузки устойчивым состоянием становится — нагруженное (точки *N*-х состояний (1, 2 и 3) с числами заполнения m_1, m_2 и m_3). При этом m_1 будет определяться числом кластеров, ушедших из состояния 1 вправо и перешедшим в данное состояние справа (т. е. влево из состояния 2). Аналогично, число заполнения m_2 определяется числом кластеров, ушедших из состояния 2 вправо и влево и перешедшим в данное состояние справа и слева, а число заполнения m_3 — числом кластеров, ушедших из состояние справа и слева, а число заполнения m_3 — числом кластеров, ушедших из состояние в данное состояние. В результате, согласно барьерной теории, составим уравнения баланса для этих чисел:

$$\begin{cases} \frac{dm_1}{dt} = -m_1 W_{\rightarrow} + m_2 W_{\leftarrow} \\ \frac{dm_2}{dt} = -m_2 (W_{\rightarrow} + W_{\leftarrow}) + m_1 W_{\rightarrow} + m_3 W_{\leftarrow} , \quad (1) \\ \frac{dm_3}{dt} = -m_3 W_{\leftarrow} + m_2 W_{\rightarrow} \end{cases}$$

где W_{\rightarrow} и W_{\leftarrow} — вероятности в секунду перехода кластера из *N*-х состояний вправо и влево.

Знак «+» у слагаемого в системе (1) означает, что кластер переходит в данное состояние, знак «–» означает, что кластер уходит из данного состояния.

Таким образом, в системе уравнений (1) изменение числа кластеров в *N*-ом устойчивом состоянии определено количествами кластеров, ушедших из *N*-ого состояния вправо (рис. 1) с вероятностью W_{\rightarrow} за секунду и влево с вероятностью W_{\leftarrow} за секунду, а также перешедших в *N*-ое состояние справа и/или слева с соответствующими вероятностями.

Пусть рассматриваемый полимерный материал состоит только из кластеров одного вида с модулем упругости E_0 . Тогда состояние этого материала характеризуется высотой барьера H, что соответствует необходимому запасу энергии для осуществления очередного поворота звена цепи, шириной энергетического зазора U (соответствует разности энергий двух соседних устойчивых состояний), величиной кванта деформации δ [14–16].

Примем, что данная система кластеров подчиняется статистике Больцмана, согласно которой вероятность

перехода P_{12} из некоторого состояния 1 в состояние 2 (и обратного перехода P_{21} – из состояния 2 в состояние 1) определяется высотами энергетических барьеров H_{12} и H_{21} , тогда:

$$P_{12} = P_0 \exp(-H_{12}/T),$$

 $P_{21} = P_0 \exp(-H_{21}/T),$

где *Т* — абсолютная температура; *H*/*T* — приведенная высота энергетического барьера.

Вероятность переходов за секунду выразим следующим образом:

$$W_{\rightarrow} = v_0 \exp(-H_{\rightarrow}/T), \qquad (2)$$
$$W_{\leftarrow} = v_0 \exp(-H_{\leftarrow}/T),$$

где v₀ — частота подхода к барьеру за секунду.

Поскольку энергия упругой деформации есть квадратичная форма от величины упругой деформации, то в процессе деформирования материала высота барьера в сторону увеличения размера кластера H_{\rightarrow} уменьшается на величину, пропорциональную квадрату механического упругого напряжения:

$$H_{\rightarrow} = H - \overline{\gamma} x^2,$$

где *х* — величина упругой деформации ($x = \sigma/E_0$); σ — напряжение; параметр $\overline{\gamma}$ — так называемый структурно-чувствительный коэффициент, определяемый упругой энергией и зависящий от рода материала.

Согласно рис. 1 величина высоты барьера в сторону уменьшения размера кластера: $H_{\leftarrow} = H - U + \overline{\gamma} x^2$.

Для удобства используем приведенные энергетические величины. Обозначим: $H^* = H/T$, $U^* = U/T$, $\gamma = \overline{\gamma}/T$, а также примем, что $\exp(U^*) = A$. Таким образом, получим уравнения (2) в виде:

$$W_{\to} = v_0 \exp(-H_{\to}^*) = v_0 \exp(-H_{\to}/T) = v_0 \exp(-H/T + \gamma x^2) =$$

$$= v_0 \exp(-H^*) \exp(\gamma x^2) = \frac{1}{\tau_0} \exp(-H^*) \exp(\gamma x^2),$$

$$W_{\leftarrow} = v_0 \exp(-H_{\leftarrow}^*) = v_0 \exp(-H_{\leftarrow}/T) =$$

$$= v_0 \exp(-H/T + U/T - \gamma x^2) =$$

$$= v_0 \exp(-H^*) \exp(U^*) \exp(-\gamma x^2) =$$

$$= \frac{1}{\tau_0} \exp(-H^*) \exp(U^*) \exp(-\gamma x^2).$$

Большинство синтетических полимерных материалов, которые деформируются подобным образом, отличаются лишь высотами барьера, квантом деформации и количеством кластеров. В связи с этим удобно ввести собственное время $\tau_{\rm P}$ — время релаксации, определяемое выражением $\tau_{\rm P} = \tau_0 \exp(H^*)$, где $\tau_0 = 1/v_0$ — константа материала, характеризующая среднее время перехода с высотой барьера $H \rightarrow 0$. При этом в системе (1) целесообразно перейти к безразмерному времени: $\tau = t/\tau_{\rm P}$. Тогда, введя новые обозначения, получим более компактную запись:

$$R_{+} = W_{\to} \tau_{\rm P} = \frac{1}{\tau_0} \exp(-H^*) \exp(\gamma x^2) \tau_0 \exp(H^*) = \exp(\gamma x^2),$$

$$R_{-} = W_{\leftarrow} \tau_{\rm P} = \frac{1}{\tau_0} \exp(-H^*) \exp(U^*) \exp(-\gamma x^2) \tau_0 \exp(H^*) =$$

$$= \exp(U^*) \exp(-\gamma x^2) = A \exp(-\gamma x^2).$$
(3)

В дальнейшем будем учитывать, что $R_+R_-=A$. Обозначим производную от некоторой величины X по безразмерному параметру т: $\overset{o}{X} = \frac{dX}{d\tau}$. С учетом введенных обозначений производной, а также выражения (3) при переходе к безразмерному времени, получим систему уравнений, эквивалентную системе (1):

$$\begin{cases} {}^{\circ}_{m_{1}} = -m_{1}R_{+} + m_{2}R_{-} \\ {}^{\circ}_{m_{2}} = -m_{2}(R_{+} + R_{-}) + m_{1}R_{+} + m_{3}R_{-}. \\ {}^{\circ}_{m_{3}} = -m_{3}R_{-} + m_{2}R_{+} \end{cases}$$
(4)

Согласно условию нормировки (закона сохранения числа кластеров), полное число кластеров на единицу длины данного полимерного образца:

$$m_0 = m_1 + m_2 + m_3. \tag{5}$$

Величину высокоэластичной части деформации можно представить как разность полной є и упругой *х* деформаций:

$$\varepsilon_{\rm B\mathfrak{I}} = \varepsilon - x = \delta[m_2 - m_2^0] + 2\delta[m_3 - m_3^0] = = \delta(m_2 + 2m_3) - \Delta_0, \tag{6}$$

где $\Delta_0 = \delta(m_2^0 + 2m_3^0)$ — начальная деформация.

При анализе начальной деформации Δ_0 целесообразно рассмотреть два случая.

1) Начальная деформация определяется согласно статистике Больцмана (т. е. система находится в квазиравновесном состоянии). Тогда:

$$m_2^0 = m_1^0 \exp(-U^*); m_3^0 = m_2^0 \exp(-U^*) = m_1^0 \exp(-2U^*).$$

С учетом соотношения (5) получим

$$m_0 = m_1^0 (1 + \exp(-U^*) + \exp(-2U^*)).$$

Откуда

$$m_1^0 = \frac{m_0}{1 + \exp(-U^*) + \exp(-2U^*)} = \frac{m_0 A^2}{1 + A + A^{2^*}}$$
$$m_2^0 = \frac{m_0 A}{1 + A + A^{2^*}}$$
$$m_3^0 = \frac{m_0}{1 + A + A^2}.$$

2) В случае, если начальное распределение не подчиняется статистике Больцмана («замороженное» состояние), т. е. материал находится в начальном неравновесном состоянии, величина начальной деформации Δ₀ не определена. В этом случае удобно полную деформацию отсчитывать от некоторого начального уровня Δ_0 . А для того, чтобы получить полимерный материал с начальным распределением кластеров по Больцману, необходимо обработать данный материал (например, подвергнуть отжигу).

Выразим m_1 из условия нормировки (5) и подставим в систему уравнений (4), тем самым исключим величину m_1^0 :

$$\begin{cases} {}^{o}_{m_{2}} = -m_{2}(R_{+} + R_{-}) + (m_{0} - m_{2} - m_{3})R_{+} + m_{3}R_{-} = \\ = -m_{3}(R_{+} - R_{-}) + m_{0}R_{+} - m_{2}(2R_{+} + R_{-}) \\ {}^{o}_{m_{3}} = -m_{3}R_{-} + m_{2}R_{+} \end{cases}$$
(7)

Выпишем первые производные от R₊ и R₋:

$$\overset{0}{R}_{+} = R_{+}2\gamma x x = R_{+}\alpha, \qquad (8)$$

$$\overset{o}{R}_{-} = -R_{-}\alpha, \tag{9}$$

где $\alpha = 2\gamma x x$.

Запишем первую производную от величины высокоэластичной части деформации (6) по параметру т:

$$\begin{split} \hat{\varepsilon}_{\mathrm{B}\mathcal{Y}}^{\mathrm{o}} &= \delta[m_2^{\mathrm{o}} + 2m_3^{\mathrm{o}}] = \delta[\{m_0R_+ - m_2(2R_+ + R_-) - m_3(R_+ - R_-)\} + 2m_2R_+ - 2m_3R_-] = \\ &= \delta[m_0R_+ - m_3(R_+ + R_-) - m_2R_-]. \end{split}$$
(10)

Вторая производная от величины высокоэластичной части деформации по параметру т с учетом (8) и (9) примет вид:

$$\begin{aligned} & \overset{\text{oo}}{\varepsilon} \underset{\text{B} \ni}{} = \delta \{ -[\overset{\text{o}}{m_3}(R_+ + R_-) + \overset{\text{o}}{m_2}R_-] + \\ & + \alpha [m_0 R_+ - m_3 (R_+ - R_-) + m_2 R_-] \}. \end{aligned}$$
 (11)

Подставим в полученное уравнение (11) выражения для m_2 и m_3 из системы уравнений (7) и, произведя алгебраические преобразования, получим:

$$\epsilon_{B\Im}^{oo} = \delta \{ \alpha [m_0 R_+ - m_3 (R_+ - R_-) + m_2 R_-] - [m_0 A - m_2 (A + R_-^2 - R_+^2) - m_3 2A] \}.$$
(12)

В выражениях (6) и (10) выделим часть с неизвестными величинами m_2 и m_3 и получим из них систему уравнений с двумя неизвестными:

$$\begin{cases} \delta(m_2 + 2m_3) = \varepsilon_{B\mathfrak{I}} + \Delta_0 \\ \delta[m_2 R_- + m_3 (R_+ + R_-)] = \delta m_0 R_+ - \varepsilon_{B\mathfrak{I}} \end{cases}$$
(13)

Для упрощения записей введем обозначения: $\delta m_2 = M_2$; $\delta m_3 = M_3$; $\delta m_0 = M_0$.

Правые части уравнений (13), содержащие известные величины, обозначим соответственно $\varepsilon_{B\ni} + \Delta_0 = C_1$ и $\delta m_0 R_+ - \varepsilon_{B\ni} = C_2$. Получим простую систему уравнений, эквивалентную (13):

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

=

$$\begin{cases} M_2 + 2M_3 = C_1 \\ M_2 R_- + M_3 (R_+ + R_-) = C_2 \end{cases}$$
 (14)

Решив систему уравнений (14), получим выражения для *M*₂ и *M*₃:

$$M_{2} = C_{1} \frac{R_{+} + R_{-}}{R_{+} - R_{-}} - C_{2} \frac{2}{R_{+} - R_{-}},$$
$$M_{3} = C_{2} \frac{1}{R_{+} - R_{-}} - C_{1} \frac{R_{-}}{R_{+} - R_{-}}$$

и подставим их в уравнение (12):

$$\begin{split} & \overset{\text{oo}}{\epsilon}_{\text{B}\ni} = \alpha \Bigg[M_0 R_+ - C_2 + C_1 R_- + C_1 R_- \frac{R_+ + R_-}{R_+ - R_-} - C_2 \frac{2R_-}{R_+ - R_-} \Bigg] - \\ & - M_0 A + (A + R_-^2 - R_+^2) \Bigg[C_1 \frac{R_+ + R_-}{R_+ - R_-} - C_2 \frac{2}{R_+ - R_-} \Bigg] + \\ & + 2A \left[C_2 \frac{1}{R_+ - R_-} - C_1 \frac{R_-}{R_+ - R_-} \right]. \end{split}$$

Окончательно, подставляя M₀, C₁ и C₂, после алгебраических преобразований получим следующее дифференциальное уравнение:

$$\begin{aligned} & \stackrel{\text{oo}}{\epsilon} \stackrel{\text{o}}{}_{\text{B}\Im} + \stackrel{\text{o}}{\epsilon}_{\text{B}\Im} \left[R_{+} - R_{-} - \frac{\alpha(R_{+} + R_{-})}{R_{+} - R_{-}} \right] + \\ & + \epsilon_{\text{B}\Im} \left[R_{+}^{2} - R_{-}^{2} + A + \frac{2A\alpha}{R_{+} - R_{-}} \right] - \\ & - \delta m_{0} (2R_{+}^{2} + A) + \Delta_{0} (R_{+}^{2} + R_{-}^{2} + A) + \\ & + \alpha \delta m_{0} 2A - \frac{\alpha \Delta_{0} 2A}{R_{+} - R_{-}} = 0. \end{aligned}$$
(15)

Таким образом, рассмотрев физическую модель, имеющую три устойчивых состояния, на основании теории барьеров получено определяющее уравнение (15), которое дает возможность описать и спрогнозировать статические и динамические режимы деформирования полимерных материалов.

Отметим, что уравнение (15) представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка по времени, следовательно, решение данного уравнения в определенных случаях приводит к колебательному режиму релаксации. Потому в колебательной системе даже с одной внешней степенью свободы при периодическом внешнем нагружении образца с некоторой частотой Ω возможно ее взаимодействие с собственной частотой системы (0).

Применение определяющего уравнения к статическому режиму деформирования

В случае режима деформирования с постоянным уровнем нагрузки σ = const (упругая деформация $x = \sigma/E_0$) уравнение (15) примет более простой вид:

$$\stackrel{\circ\circ}{\epsilon}_{\mathrm{B}\ni}(R_+-R_-)+\stackrel{\circ}{\epsilon}_{\mathrm{B}\ni}(R_+-R_-)^2+$$

$$+ \varepsilon_{\rm B}(R_+ - R_-)[R_+^2 - R_-^2 + A] = (16)$$

$$\delta m_0 (2R_+^2 + A)(R_+ - R_-) - \Delta_0 (R_+^2 - R_-^2 + A)(R_+ - R_-).$$

Уравнение (16) — линейное неоднородное дифференциальное уравнение второго порядка с постоянными коэффициентами, которое в общем случае представим следующим образом:

$$a\varepsilon_{\rm B3}^{\rm oo} + b\varepsilon_{\rm B3}^{\rm o} + c\varepsilon_{\rm B3} = K - G_0 = \Theta,$$
(17)

где введены промежуточные обозначения: $a = (R_+ - R_-);$ $b = (R_+ - R_-)^2; c = (R_+ - R_-)[(R_+^2 - R_-^2) + A]; K = \delta m_0(2R_+^2 + A)(R_+ - R_-)$ — коэффициент, характеризующийся уровнем начальной нагрузки; $G_0 = \Delta_0(2R_+^2 + R_-^2 + A) \times C_0^2$ $\times (R_+ - R_-).$

Найдем дискриминант характеристического уравнения (17) и исследуем его.

Поскольку $D = 4ac - b^2$, то в данном случае получим, что D < 0. Тогда $\sqrt{|D|} = \sqrt{3}(R_+ - R_-)(R_+ + R_-)$, а корни характеристического уравнения будут иметь вид:

$$\lambda_{1,2} = -\beta \pm i\omega,$$

где $\omega = \frac{\sqrt{3}}{2}(R_+ + R_-); \beta = \frac{R_+ - R_-}{2}.$

В результате получим общее решение определяющего уравнения (16) в явном виде:

$$\varepsilon_{\rm BO}(t) = \varepsilon^0 e^{-\beta \frac{t}{\tau_{\rm P}}} \left(\cos \frac{\omega}{\tau_{\rm P}} t + \frac{\beta}{\omega} \sin \frac{\omega}{\tau_{\rm P}} t \right) + \frac{\Theta}{c},$$

где $\varepsilon^0 = \varepsilon_{B\Theta}(0)$ — начальный уровень деформации. Перепишем уравнение (17), учитывая, что $\varepsilon_{B \ni} = \varepsilon - x$:

$$a\varepsilon^{00} + b\varepsilon^{0} + c\varepsilon = cx + \Theta.$$

Решим задачу Коши с начальными условиями $\varepsilon(0) = \varepsilon^0$; $\dot{\varepsilon}(0) = 0$. В результате получим

$$\varepsilon(\tau) = Le^{-\beta\tau} \left(\cos\omega\tau + \frac{\beta}{\omega}\sin\omega\tau\right) + B$$

где *L* и *B* — некоторые коэффициенты, которые определяются через начальные и граничные условия.

При этом
$$\varepsilon^0 = L + B$$
, a $\overset{o}{\varepsilon} = Le^{-\beta\tau} \left[-\beta \left(\cos\omega\tau + \frac{\beta}{\omega} \sin\omega\tau \right) + \left(\frac{\beta}{\omega} \cos\omega\tau - \omega\sin\omega\tau \right) \right] = 0.$
Тогда
 $\varepsilon(\tau) = (\varepsilon^0 - B)e^{-\beta\tau} \left(\cos\omega\tau + \frac{\beta}{\omega} \sin\omega\tau \right) + B.$

При $\tau \to \infty$, $B = \varepsilon_{\infty}$, и общее решение определяющего уравнения примет вид:

$$\varepsilon(\tau) = (\varepsilon^0 - \varepsilon_{\infty})e^{-\beta\frac{t}{\tau_{\rm p}}} \left(\cos\frac{\omega}{\tau_{\rm p}}t + \frac{\beta}{\omega}\sin\frac{\omega}{\tau_{\rm p}}t\right) + \varepsilon_{\infty}.$$
 (18)

ω

Обозначим $\frac{\omega}{\tau_{\rm P}} t = z$ и примем во внимание, согласно уравнениям (3), что при значительных уровнях нагруз-

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6 ки $R_{-} = \frac{A}{R_{+}} << 1$, отношение $\frac{\beta}{\omega} = \frac{1}{\sqrt{3}}$. Получим уравнение (18) в виде:

$$\varepsilon(z) = \frac{\sqrt{3}}{2} (\varepsilon^0 - \varepsilon_\infty) e^{-\frac{z}{\sqrt{3}}} \left(\sin\left(z + \frac{\pi}{3}\right) + \varepsilon_\infty \right).$$
(19)

Перепишем уравнение (19) для режима ползучести:

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_{\infty} \left[1 - \frac{\sqrt{3}}{2} e^{-\frac{z}{\sqrt{3}}} \sin\left(z + \frac{\pi}{3}\right) \right].$$
(20)

Введем функцию

$$\varphi(z) = \frac{\sqrt{3}}{2} e^{-\frac{z}{\sqrt{3}}} \sin\left(z + \frac{\pi}{3}\right).$$
(21)

Тогда уравнение (20) примет вид:

$$\varepsilon(z) = \varepsilon_{\infty}[1 - \varphi(z)]. \tag{22}$$

Аналогичным образом из (19) получим выражение для режима восстановления:

$$\varepsilon(z) = (\varepsilon^0 - \varepsilon_\infty)\varphi(z) + \varepsilon_\infty.$$

Экспериментальная проверка полученного результата

Применим выражение (22) для теоретического расчета кривых ползучести. Для этого используем универсальную функцию (21) и вычислим ее численные значения от параметра *z*.

Для сравнения используем экспериментальные «семейства» кривых ползучести для нити полиэтилентерефталата, полученные при разных уровнях нагрузки (рис. 2).

Обозначим в формуле (22) величину $[1 - \varphi(z)] = = \psi(z)$. Тогда текущее значение деформации для расчета запишем в виде $\varepsilon = \psi(z)\varepsilon_m$.

Выберем для примера кривую 6 на рис. 2, для которой максимальное значение $\varepsilon_m = 3$.

При этом $\varepsilon_{\infty} = \psi_m \varepsilon_m = 1,12\varepsilon_m$.

Для функции
$$\psi(1,8) = 0,91$$
 найдем $\varepsilon = \frac{0,91}{1,12} \varepsilon_{\infty} = 2,73$

Этому значению деформации соответствует момент времени t = 300 с. Тогда $\psi(z) = \psi\left(\frac{1.8}{300}t\right)$. Подставив значения моментов времени в данную функцию, вычислим текущие значения деформации. Например, для t = 1000 с, $\psi(z) = \psi\left(\frac{1.8}{300} \cdot 1000\right) = \psi(6) = 0,981$, а деформация $\varepsilon = \psi(z)\varepsilon_m = 0,981 \cdot 3 = 2,94$.

Аналогичным образом выполним расчет точек для кривых, соответствующих другим уровням нагрузки — 180 МПа и 146 МПа. Полученные значения для кривых *6*, *5* и *3* нанесены точками на рис. 2.



Рис. 2. Кривые ползучести полиэтилентерефталата при разных уровнях нагрузки σ: 1 — 97 МПа; 2 — 121 МПа; 3 — 146 МПа; 4 — 170 МПа; 5 — 180 МПа; 6 — 206 МПа *Fig. 2.* Creep curves for polyethylene terephthalate thread vs. the stress level σ: 1 — 97 MPa; 2 — 121 MPa; 3 — 146 MPa; 4 — 170 MPa; 5 — 180 MPa; 6 — 206 MPa

В результате анализа полученных экспериментальных кривых ползучести и расчетных значений видно согласование данных теории и эксперимента. Можно сделать вывод, что рассматриваемая двухбарьерная модель пригодна для описания ползучести синтетических полимерных материалов.

Заключение

Рассмотрена физическая модель ориентированных полимерных материалов, в основе которой лежит теория энергетических барьеров. Приведено описание модели с двумя энергетическими барьерами, имеющая при этом три устойчивых состояния макромолекул. В результате преобразования уравнений баланса чисел заполнения состояний получено определяющее уравнение для одноосно ориентированных полимерных материалов, которое представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка по времени. Полученное определяющее уравнение дает возможность описывать и прогнозировать как статические, так и динамические режимы деформирования. В качестве примера приведено решение уравнения для случая режима деформирования с постоянным уровнем нагрузки. В результате для режима ползучести получено выражение для деформации, содержащее универсальную функцию и имеющее простой вид. Методом совмещения полученных кривых ползучести показано, что теоретические выводы находятся в согласии с экспериментальными данными, что свидетельствует о пригодности рассмотренного метода моделирования к описанию процесса ползучести в полимерных материалах.

Литература

- Каргин В.А., Слонимский Г.Л. Краткие очерки по физико-химии полимеров. М.: Химия, 1967. 232 с.
- Марихин В.А., Мясникова Л.П. Надмолекулярная структура полимеров Л.: Химия, 1977. 240 с.
- Джейл Ф.К. Полимерные монокристаллы: пер. с англ. Л.: Химия, 1968. 552 с.
- Слонимский Г.Л., Павлов В.И. К вопросу о влиянии типа и размера элементов надмолекулярной структуры полимера на его механические свойства // Высокомолекулярные соединения. 1965. Т. 7. № 7. С. 1279–1282.
- Вундерлих Б. Физика макромолекул. Т. 1. Кристаллическая структура, морфология, дефекты: пер. с англ. М.: Мир, 1976. 624 с.
- Структура волокон: пер. с англ. / под ред. Д.В.С. Херла, Р.Х. Петерса. М.: Химия, 1969. 400 с.
- Перепелкин К.Е. Структура и свойства волокон. М.: Химия, 1985. 208 с.
- 8. Аскадский А.А. Деформация полимеров. М.: Химия, 1973. 448 с.
- 9. Бугаков И.И. Ползучесть полимерных материалов. М.: Наука, 1973. 288 с.
- Сталевич А.М. Деформирование ориентированных полимеров. СПб.: СПбГУТД, 2002. 250 с.
- Макаров А.Г. Прогнозирование деформационных процессов в полимерных материалах: монография. СПб.: СПбГУТД, 2002. 220 с.
- Сталевич А.М., Гинзбург Б.М. Об одном из надмолекулярных механизмов нелинейной вязкоупругости ориентированных полимеров // Журнал технической физики. 2004. Т. 74. № 11. С. 58–62.
- Demidov A.V., Makarov A.G., Stalevich A.M. Study of the elastic, viscoelastic, and plastic characteristics of chemical fibres // Fibre Chemistry. 2007. V. 39. N 6. P. 492–496. https://doi.org/10.1007/ s10692-007-0108-6
- 14. Rymkevich P.P., Romanova A.A., Golovina V.V., Makarov A.G. The energy barriers model for the physical description of the viscoelasticity of synthetic polymers: application to the uniaxial orientational drawing of polyamide films // Journal of Macromolecular Science. Part B: Physics. 2013. V. 52. N 12. P. 1829– 1847. https://doi.org/10.1080/00222348.2013.808906
- Rymkevich P.P., Gorshkov A.S., Makarov A.G., Romanova A.A. Main constitutive equation of the viscoelastic behavior of unixially cooriented polymers // Fibre Chemistry. 2014. V. 46. N 1. P. 28–32. https://doi.org/10.1007/s10692-014-9555-z
- 16. Рымкевич П.П. Разработка научных основ и методов прогнозирования термовязкоупругих свойств полимерных материалов текстильной и легкой промышленности: диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук. СПбГУТД, 2018. 299 с.
- Головина В.В., Шахова Е.А., Рымкевич П.П. Уравнение состояния полимерных нитей // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2020. Т. 20. № 6. С. 877–882. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2020-20-6-877-882

Авторы

Головина Виктория Владимировна — кандидат технических наук, доцент, доцент, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация, sc 17434019700, https://orcid.org/0000-0002-2691-7680, victoria_gol@ mail.ru

Рымкевич Павел Павлович — доктор технических наук, доцент, профессор, Военно-космическая академия имени А.Ф. Можайского, Санкт-Петербург, 197198, Российская Федерация, sc 6506856521, https://orcid.org/0000-0002-9362-0561, romallaa@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 01.07.2023 Одобрена после рецензирования 04.10.2023 Принята к печати 17.11.2023



References

- Kargin V.A., Slonimskii G.L. Brief essays on physico-chemistry of polymers. Moscow, Himija Publ., 1967, 232 p. (in Russian)
- Marikhin V.A., Miasnikova L.P. Supramolecular Structure of Polymers. Leningrad, Himija Publ., 1977, 240 p. (in Russian)
- Geil Ph.H. Polymer Single Crystals. Interscience Publishers, 1963, 560 p.
- Slonimskii G.L., Pavlov V.I. Effect of the type and dimensions of supermolecular structure on the mechanical properties of the polymer. *Polymer Science U.S.S.R.*, vol. 7, no. 7, pp. 1419–1423. https://doi. org/10.1016/0032-3950(65)90219-4
- Wunderlich B. Macromolecular Physics. V. 1. Crystal Structure, Morphology, Defects. Academic Press, 1976, 564 p.
- Fibre Structure. Ed. by J.W.S. Hearle, R.H. Peters. Manchester, London, The Textile Institute Butterworhs, 1963.
- Perepelkin K.E. Structure and Properties of Fibers. Moscow, Himija Publ., 1985, 208 p. (in Russian)
- Askadskii A.A. Polymer Deformation. Moscow, Himija Publ., 448 p. (in Russian)
- Bugakov I.I. Drift of Polymer Materials. Moscow, Nauka Publ., 1973, 288 p. (in Russian)
- Stalevich A.M. Deformation of Oriented Polymers. St. Petersburg, SPbSUITD, 2002, 250 p. (in Russian)
- Makarov A.G. Prediction of Deformation Processes in Textile Materials. St. Petersburg, SPbSUITD Publ., 2002, 220 p. (in Russian)
- Stalevich A.M., Ginzburg B.M. On one supramolecular mechanism of the nonlinear viscoelasticity of oriented polymers. *Technical Physics*, 2004, vol. 49, no. 11, pp. 1452–1456. https://doi. org/10.1134/1.1826189
- Demidov A.V., Makarov A.G., Stalevich A.M. Study of the elastic, viscoelastic, and plastic characteristics of chemical fibres. *Fibre Chemistry*, 2007, vol. 39, no. 6, pp. 492–496. https://doi.org/10.1007/ s10692-007-0108-6
- 14. Rymkevich P.P., Romanova A.A., Golovina V.V., Makarov A.G. The energy barriers model for the physical description of the viscoelasticity of synthetic polymers: application to the uniaxial orientational drawing of polyamide films. *Journal of Macromolecular Science. Part B: Physics*, 2013, vol. 52, no. 12, pp. 1829–1847. https://doi.org/10.1080/00222348.2013.808906
- Rymkevich P.P., Gorshkov A.S., Makarov A.G., Romanova A.A. Main constitutive equation of the viscoelastic behavior of unixially cooriented polymers. *Fibre Chemistry*, 2014, vol. 46, no. 1, pp. 28–32. https://doi.org/10.1007/s10692-014-9555-z
- Rymkevich P.P. Development of scientific foundations and prediction methods for the thermoviscoelastic properties of polymeric materials in the textile and consumer industry. Dissertation for the degree of doctor of technical sciences. St. Petersburg, 2018, 299 p. (in Russian)
- Golovina V.V., Shakhova E.A., Rymkevich P.P. Condition equation of polymer filaments. *Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2020, vol. 20, no. 6, pp. 877–882. (in Russian). https://doi.org/10.17586/2226-1494-2020-20-6-877-882

Authors

Victoria V. Golovina — PhD, Associate Professor, Associate Professor, Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation, se 17434019700, https://orcid.org/0000-0002-2691-7680, victoria_gol@mail.ru

Pavel P. Rymkevich — D.Sc., Associate Professor, Professor, Mozhaisky Military Aerospace Academy, Saint Petersburg, 197198, Russian Federation, sc 6506856521, https://orcid.org/0000-0002-9362-0561, romallaa@yandex.ru

Received 01.07.2023 Approved after reviewing 04.10.2023 Accepted 17.11.2023

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6 **VİTMO**

HAV4HO-TEXHIV4ECKИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ TEXHOЛOГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Toм 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1205-1213

Design of microstrip patch antenna using Fennec Fox optimization with SSRR metamaterial for terahertz applications

Sangeeta Kumari¹, Arvind Kumar^{2⊠}, Ettiyappan Anbalagan³, Kiran Kumar Thoti⁴, Manoj Sharma⁵

1,2 BIT Sindri, Sindri, 828123, India

³ Saveetha School of Engineering, Saveetha Institute of Medical and Technical Sciences, Chennai, 600095, India

⁴ University Malaysia Kelantan, Kota Bharu, 16100, Malaysia

⁵ Manipal University Jaipur, Jaipur, 303007, India

¹ sangeeta.ece@bitsindri.ac.in, https://orcid.org/0009-0006-8456-2167

² arvindkr.ece@bitsindri.ac.in^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-4716-3582

³ eanbalagan77@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5727-0605

⁴ kirankumar3561@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-6678-9425

⁵ m0918.sharma@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2886-4217

Abstract

This paper presents the design of a microstrip patch antenna based on a Square Split Ring Resonator (SSRR). Wireless technology is switching from 4G to 5G due to the need to overcome limitations, such as low throughput, high latency and path loss. To increase data transfer speeds, the next generation of wireless networks uses 5G terahertz technology. The use of microstrip patch antennas in wireless technologies has increased significantly due to their low cost and simplicity of design as well as the ease of printed circuit board fabrication. However, in some cases their use is limited by low bandwidth, low gain and low throughput. To solve these problems, the Fennec Fox optimization algorithm is used. The algorithm allows you to optimize the length of the microstrip patch antenna is set according to the most suitable length selected. To increase the bandwidth and Voltage Standing Wave Ratio (VSWR), a square split ring resonator (SSRR) is used as a metamaterial. An evaluation of the designed microstrip patch antenna model with existing patch antennas was performed. The estimated values of the parameters of the proposed model were the following values: return loss –72.54 dB, resonant frequency 1.11 THz, achieved gain 15.25 dB, VSWR value 1.5646. The estimated values of the developed model exceed those of existing samples. Thus, the developed microstrip patch antenna using Fennec Fox optimization and square split ring resonator metamaterial shows better results in the terahertz range.

Keywords

wireless technology, gain, resonant frequency, microstrip patch antenna, MPA, square split ring resonator, SSRR

For citation: Kumari S., Kumar A., Anbalagan E., Kumar Thoti K., Sharma M. Design of microstrip patch antenna using Fennec Fox optimization with SSRR metamaterial for terahertz applications. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1205–1213. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1205-1213

УДК 621.396.67

Проектирование микрополосковой патч-антенны на основе метаматериала SSRR для терагерцового диапазона с использованием алгоритма оптимизации Fennec Fox Сангита Кумари¹, Арвинд Кумар^{2⊠}, Эттияппан Анбалаган³, Киран Кумар Тоти⁴,

Манодж Шарма⁵

1,2 БИТ Синдри, Синдри, 828123, Индия

³ Инженерная школа Савиты, Институт медицинских и технических наук Саветы, Ченнай, 600095, Индия

⁴ Государственный университет в Келантане, Кота-Бару, 16100, Малайзия

⁵ Университет Манипал в Джайпуре, Джайпур, 303007, Индия

© Kumari S., Kumar A., Anbalagan E., Kumar Thoti K., Sharma M., 2023

- ¹ sangeeta.ece@bitsindri.ac.in, https://orcid.org/0009-0006-8456-2167
- ² arvindkr.ece@bitsindri.ac.in^{\[\]}, https://orcid.org/0000-0002-4716-3582
- ³ eanbalagan77@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5727-0605
- ⁴ kirankumar3561@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-6678-9425
- ⁵ m0918.sharma@gmail.com, https://orcid.org/0000-0003-2886-4217

Аннотация

Представлена конструкция микрополосковой патч-антенны на основе квадратного разъемного кольцевого резонатора (Square Split Ring Resonator, SSRR). Беспроводная технология связи переходит со стандарта 4G на стандарт 5G из-за необходимости снятия таких ограничений, как невысокая пропускная способность, большая задержка и потери на пути передачи данных. В следующем поколении сетей беспроводной связи для повышения скорости передачи данных применяется терагерцовая технология 5G. Применение микрополосковых патч-антенн в беспроводных технологиях значительно расширилось благодаря их низкой стоимости, простоте конструкции и процесса изготовления печатной платы. Однако в ряде случаев применение патч-антенн ограничивается малой полосой пропускания, небольшим коэффициентом усиления и низкой пропускной способностью. Для решения этих проблем используется алгоритм оптимизации Fennec Fox, который позволяет оптимизировать длину микрополосковой патч-антенны, усилить сигнал и снизить обратные потери. В качестве подложки использован бакелит. Ширина микрополосковой патч-антенны установлена в соответствии с наиболее подходящей выбранной длиной. Для увеличения полосы пропускания и коэффициента стоячей волны по напряжению (КСВН) в качестве метаматериала применен резонатор на основе SSRR. Выполнена оценка спроектированной и существующих моделей микрополосковых патч-антенн. Оценочные значения параметров предлагаемой модели составили следующие величины: обратные потери –72,54 дБ, резонансная частота 1,11 ТГц, достигнутое усиление 15,25 дБ, значение КСВН 1,5646. Полученные значения параметров разработанной модели превосходят показатели существующих образцов. Таким образом, разработанная микрополосковая патч-антенна с использованием оптимизации Fennec Fox и метаматериала на основе квадратного разъемного кольцевого резонатора показала лучшие результаты в терагерцовом диапазоне.

Ключевые слова

беспроводная технология, прирост, резонансная частота, микрополосковая патч-антенна, MPA, квадратный разъемный кольцевой резонатор, SSRR

Ссылка для цитирования: Кумари С., Кумар А., Анбалаган Э., Кумар Тоти К., Шарма М. Проектирование микрополосковой патч-антенны на основе метаматериала SSRR для терагерцового диапазона с использованием алгоритма оптимизации Fennec Fox // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1205–1213 (на англ. яз.). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1205-1213

Introduction

In daily life, wireless connectivity is crucial and acts as the transmission medium for sending data or information wirelessly from one location to another [1]. This enables data interchange across Radio Frequency (RF) and microwave frequencies without using a conductor. Electromagnetic waves are the medium used in wireless communication to transport data among the sender and the recipient [2]. High-speed data transfer between various electrical devices is necessary for next-generation wireless communication [3]. Terahertz (THz) frequency band is a range of frequencies between 0.1 to 10 THz that might be used for high-speed data transfer [4]. The terahertz frequency range is currently generating a lot of attention because of its higher data rate, higher bandwidth, nonionizing nature and excellent determination in wireless communication [5]. Its spectral range is situated between the RF and mid-infrared regions, which may accommodate bandwidths as high as hundreds of GHz.

In the future years, the THz frequency range will enable high-channel capacity, increased data speeds and excellent quality broadcast capabilities [6]. Emitting or receiving electromagnetic waves is the purpose of an antenna. Traditional microwave antennas, which are often employed in various real-world applications, lack some of the benefits that microstrip antennas can execute [7]. The most basic and widely used microstrip antennas are rectangular and circular patches. The patch antenna is a key component of the existing wireless communication system that has been essential in this development [8]. Microstrip patch antennas (MPAs) are smaller, lighter, cheaper, easier to make and more easily integrated into wireless communication and mobile radio applications than traditional microwave antennas [9, 10]. Their primary drawbacks are reduced gain and bandwidth which may be greatly increased using various ways.

Utilizing metamaterials is one of the key techniques, an artificial material unavailable in nature [11]. Its qualities are determined by its structure which can be elliptical, rectangular, triangular, circular, or any other form, rather than by the materials it is composed [12]. The magnetic permeability, electric permittivity and index of refraction for natural materials are often positive. However, some of the properties are negative in metamaterials, and they are referred to as Negative Index Materials and Left-Handed Materials [13]. Metamaterials are used in the development of ideal lenses, wave retarders, absorbers, cloaks, and antennas [14, 15]. A parameter-based metamaterial MPA is designed to increase the terahertz resonant frequency for diverse applications. Major contributions of the designed model are:

- Designing a MPA using an optimization algorithm with Square Split Ring Resonator Metamaterial for Terahertz Applications;
- Bakelite material is employed as a substrate in the MPA for its better dielectric constant and loss tangent;
- Dimensions of the MPA are optimally selected using the Fennec Fox optimization;

 The Square Split Ring Resonator (SSRR) is used as a metamaterial to enhance the antenna gain and bandwidth.

Literature Survey

Many MPAs based on metamaterials are developed to enhance the bandwidth and gain of the antenna. Some related articles that use metamaterial MPAs have been researched and reviewed here.

Sağık et al. [16] had designed metamaterial structures by using the Artificial Neural Network (ANN) approach for optimizing the gain and directivity of a microstrip antenna. The radiation curves of the antennas can be formed by orienting them in accordance with the power densities that achieves in a particular direction which has been previously established. Using the best metamaterial structure, it was intended to enhance the gain and directivity of MPAs based on this characteristic of antennas. The developed metamaterial structures interacted with the antenna to train the ANN approach is to predict the best suitable values for the antenna gain, frequency and directivity.

Guttula et al. [17] had developed a MPA via an improved metaheuristic algorithm using an optimization algorithm. In order to support the development of the solution spaces for antenna restrictions, an alternative approach has been developed in this study. Elephant Herding Optimisation with Distinct Scaling Factor, an improved optimization method that modifies the MPA parameters having being developed. By choosing the MPA substrate thickness, patch length, width and dielectric value, the designed work aimed to attain optimum antenna gain. At last, the designed model was verified in terms of gain, cost and efficiency analysis was conducted.

Suraj et al. [18] had performed an optimized metamaterials-based WiFi antenna based on a genetic algorithm. The MPA for International Safety Management applications is described in this study and includes SSRR components at the ground plane. The antenna properties were increased as necessary by including the metamaterials that have been physically engraved into the ground without altering its radiating patch. The left-handed activity of metamaterials influenced by the direct contact of SSRR with electric fields is frequently represented as shunt inductance and series capacitance. The developed metamaterials antenna produces an increased gain while shrinking in size after a genetic algorithm is included.

Shamim et al. [19] had introduced a high-speed terahertz applications model with the miniaturized wideband MPA. This model of wireless communication MPA has a 0.72 THz resonance frequency. This designed antenna consists of an impedance bandwidth of 37.50 % and 0.72 THz centre frequency with a 0.53 to 0.84 THz frequency range. Input impedance, input loss, Voltage Standing Wave Ratio (VSWR) and radiation patterns in the E-planes and H-planes are used to demonstrate the result. The designing and simulation were done by utilizing the finite difference time domain method and a simulator based on full-wave electromagnetic with the CST Studio suite.

Singh et al. [20] had designed MPA for Ultra-Wideband (UWB) applications with the Moth-Flame optimization algorithm. MPAs are designed to work in dual and multi-band applications due to their inexpensive price, lightweight and simple installation. The antenna performance was enhanced, while the material cost was decreased by using the liquid crystal polymer substrate with the appropriate geometrical parameters. The MFO-optimized antenna has a small dimension of 50×50 mm, which enhances antenna performance. The antenna working bandwidth was 3.1 GHz, and its 20 dB Return Loss (RL) covered UWB applications. Comparing the simulation results to the preceding approaches, the designed model shows better radiation pattern, impedance bandwidth, directivity and steady gain for the entire frequency spectrum.

Different versions with varied MPAs have been developed in THz frequency that ranges for various applications based on the materials examined above. They basically chose to create an antenna with a higher size or a narrower bandwidth. Further research is required in MPA to enable data transferring at THz frequency in wireless communication. Thus, the optimized MPA is created to increase data transmission bandwidth at THz frequency.

Design of an Optimized MPA

MPAs are inexpensive with a small profile that is simple to develop and they can be integrated with electronic devices. To construct a high-performance antenna, one must understand the various antenna parameters in-depth. These parameters include the radiating patch, loss tangent, feeding method, dielectric material thickness and constant value. The material used for the substrate is positioned with the same width and length as placed between the radiating patch and ground plane.

Fig. 1 demonstrates the metamaterial-based MPA for terahertz applications. Fig. 1 illustrates the structure of an MPA which contains a radiating patch on one side and a ground plane on the other. The substrate, feed line, and radiating patch make up the layout. By using the microstrip inset method, a rectangular patch is supplied. In this model, the radiator patch is generated on a Bakelite substrate which is a material with the specified parameters such as loss tangent of 0.0002 and a relative permittivity of 4.8 intended for the development. The Fennec Fox Optimisation chooses the patch antenna ideal length and breadth for radiating. Based on the optimally selected length and width, the slot length and width and the insert feed length and width are



Fig. 1. Metamaterial-based MPA

determined for designing the metamaterial-based patch antenna. The metamaterial used in this model is a SSRR.

MPA parameters

The basic parameters used for designing the MPA are length (L), width (W) and height (H) of the substrate, length of the ground (L_g), microstrip feed width (W_p), inset feed width (W_f), inset feed length (L_f), slot length (L_s), width of the ground (W_g), slot width (W_s), and feed location (L_i). The patch antenna length and breadth have been determined best within these parameters corresponding to the fitness function of decreasing the resonant frequency. The resonant frequency is the frequency at which the patch receives the most power or when the feedline and patch impedances are most closely matched. It is also the juncture at which the impedance is purely resistive and inductive reactance equals the capacitive reactance.

Resonant frequency,
$$fr = \frac{c}{2L\sqrt{\varepsilon_{reff}}}$$
. (1)

Here, ε_{reff} denotes the effective dielectric constant, *c* denotes the speed of light in free space, and *L* signifies the length of the patch antenna.

Equations illustrated below are used to obtain the effective length and dielectric constant.

$$\varepsilon_{reff} = \frac{\varepsilon_r + 1}{2} + \frac{\varepsilon_r - 1}{2} \left(1 + \frac{12H}{W} \right)^{-0.5},$$
$$L_{eff} = L + 2\Delta L,$$

where ε_r represents the substrate dielectric constant; the patch antenna width, length and height are denoted as *W*, *L* and *H*.

Width of the microstrip patch antenna,

$$W = \frac{c}{2f_r} \sqrt{\frac{2}{\varepsilon_r + 1}}.$$

These parameters are determined for designing the MPA with minimal RL. The patch height is optimally selected using the Fennec Fox optimization algorithm.

Fennec Fox optimization algorithm

Fennec foxes are found in North Africa and Egypt's Sinai Peninsula as members of the Vulpes family of foxes [21]. Because of its huge ears, the fennec fox can be easily recognized. An omnivorous creature that consumes fruits, certain tubers, small birds, skinks and eggs. The fennec fox has two more significant qualities than its other abilities. These qualities include an effective digging ability and a means of avoiding predators. The two abilities of the fennec fox's behaviours are much more important than the rest of them. Some of these characteristics include the ability to dig deeply and the capacity to escape from predators. Fennec foxes build their nests in the sand, and they immediately dig their prey out of the sand after detecting their movements beneath because they are sensitive to the motions of tiny animals and insects.

Parameter optimization for the MPA

For selecting the optimal width and length of MPA, the Fennec Fox optimization algorithm is used. Some of the steps that are considered for optimal length and width are initialization, fitness function evaluation, updating and termination.

Step 1: Initialization. The optimal values for the width and length of the MPA are selected by initializing the values ranging from $90-120 \mu m$. These values are initialized according to the following equation.

$$F = (X_1, X_2, X_3, \dots, X_n).$$

Step 2: Fitness Function. Fitness function for the optimal value selection of length for the MPA is illustrated in the below equation.

$$fitness = \{ maximize(f_r) \}$$

By maximizing the resonant frequency of the MPA using the equation (1), the length can be optimally selected.

Step 3: Updating. Similarly, until the optimal solution is found, the various length values are updated using the below equations.

$$Z_{a}^{rand}:Z_{a,b}^{rand} = Z_{L,b}, L \in \{1, 2, 3, 4, 5, ..., N\},$$

$$i = 1, 2, 3, 4, 5, ..., N$$

$$Z_{a,b}^{p2} = \begin{cases} z_{a,b} + r \times (Z_{a,b}^{rand} - I \times z_{a,b}), G_{a}^{rand} < G_{a}; \\ z_{a,b} + r \times (z_{a,b} - Z_{a,b}^{rand}), \text{ else}, \end{cases}$$

$$Z_{a} = \begin{cases} z_{a}^{p2}, G_{a}^{p2} < G_{a}; \\ Z_{a}, \text{ else}, \end{cases}$$

where, G_a^{rand} is the objective function value, $z_{a,b}^{p2}$ and $Z_{a,b}^{rand}$ are its *b*th dimension, Z_a^{rand} denotes the escape of the *a*th Fennec Fox from the intended target position, z_a^{p2} signifies the new suggested status for the second phase of the *a*th Fennec Fox, G_a^{p2} represents the objective function value, and *I* signifies the random number.

Step 4: Termination. After the attainment of best solution, the process will get terminated. Based on the optimally selected length of the MPA, the width of the MPA can be determined and both are simulated for evaluating the performance of the model.

Experimental analysis of designed MPA

MATLAB and HFSS tool are used to create the metamaterial-based MPA for evaluating this proposed model. The Finite Element Method (FEM) is the most widely used commercial FEM for electromagnetic structures in HFSS tool. To correctly optimize the antenna settings, this is particularly beneficial for antenna engineers. The Intel i5-10th Gen processor, CPU @ 2.50 GHz, NVIDIA GTX 1650 4 GB (GDDR6) GPU, 16 GB Memory (RAM), and 64-bit operating system are used to perform the testing. The designed MPA using the ANSYS HFSS tool is illustrated in Fig. 2, *a*.

Fig. 2, *b* illustrates the MPA in this model which is based on the SSRR [22] metamaterial with the 3×3 unit cell structure. For optimally selecting the length of the



Fig. 2. The developed model of the MPA (a) and the design of the MPA based on the SSRR metamaterial (b)

Dimensions, µm
150
180
10
150
180
90 (optimally selected)
120
5
40
98
50
20
0.1
0.2
0.2

Table 1. Parameters for designing the MPA

micro patch, the Fennec Fox optimization algorithm is used. Based on this optimally selected length, the other designing parameters for the MPA are determined.

Table 1 illustrates the derived parameters for designing the MPA with SSRR metamaterial. Analysing the MPAs



Fig. 3. Return loss for with and without optimized parameterbased proposed patch antenna

RL, both with and without metamaterial allows for a more accurate evaluation of the intended model. While evaluating an antenna RL performance, maximum transfer of power theory and impedance matching are an essential factors. They measure the efficiency with which an antenna transfers electricity from an electrical source to an antenna. The proportion of the incident antenna power to the power p_{in} reflected back from the source antenna p_{ref} is known as the RL.

Fig. 3 illustrates the RL of the MPA with and without optimized parameter. The metamaterial surface is built using a Split Ring Resonator in the shape of a square. The proposed SSRR is made up of two concentric square rings with an outer and inner radius square with a thickness of 5 μ m. The metallic component is produced by printing on a Bakelite substrate. The achieved RL of with and without optimized parameter for 1.04 THz and 1.11 THz are -36.50 dB and -72.54 dB, respectively.

Refractive index with real and imaginary graph of optimized parameter based patch antenna is illustrated in Fig. 4, a. The refractive index of the SSRR is negativeindex metamaterial whose refractive index for an electromagnetic wave has a negative value over some frequency range. Negative permittivity and permeability are produced by the metamsaterial as a result of the negative refractive index value. The refractive index of the proposed SSRR is -4 for the frequency 1.06 THz. Fig. 4, b illustrates the RL for proposed optimized length parameter compared with the different length parameter of the patch antenna. The proposed optimized parameter is 90, which is compared with the different parameters of the patch antenna that are 75, 80, 85, 95, 100 and 105. The attained RL for the proposed and different parameter values are 38 dB, 43 dB, 46 dB, 72 dB, 56 dB, 60 dB and 65 dB for the frequency of 1.1 THZ to 1.14 THz.

As illustrated in Fig. 5, the degree of directivity of the antenna radiation pattern is known as antenna gain. It is equivalent to the sum of the electrical effectiveness and directivity of the antenna. The maximum obtained gain antenna for with and without optimized value are 2.44 dB and 15.25 dB. Thus, from these attained gain values, the optimized parameter values of the MPA works with greater than the without optimized parameter value.

Fig. 6 shows RF electrical transmission system, the VSWR is the proportion of transmitted to reflected voltage standing waves. VSWR is the more popular term for SWR



Fig. 4. Refractive index of a patch antenna with optimized parameters (*a*) and comparison of return losses for patch antennas of different lengths (*b*)



Fig. 5. Gain of an antenna for with (a) and without (b) optimized value

because it frequently signifies the voltage ratio. The VSWR value obtained for the proposed model at a resonance frequency of 1.11 THz equals to 1.5 and the VSWR value of 2 were determined at 0.90 and 1.25 THz, respectively.

Transmission coefficient compares the amplitude of the transmitted wave to that of the incident wave. It is described as the ratio of the amplitudes of the transmitted and incident voltage waves. Reflection coefficient compares the amplitudes of the incident and reflected waves. It is described as the ratio of the amplitude of the incoming voltage wave to that of the reflected voltage wave. In Fig. 7, the transmission and reflection coefficient of the proposed patch antenna are illustrated. The transmission curve steepens at 1.09 THz, the same frequency at which the reflection curve peaks. This suggests that a resonance exists at 1.10 THz. The periodic arrangement of each unit cell causes it to function as a microwave resonant circuit.

MPAs are designed based on various substrate materials with different dimensions, which are illustrated in Table 2. For comparison, the proposed model is evaluated for RL, resonant frequency, gain and VSWR. The existing methods compared with the proposed model are FR4 [18], Roger RT Duroid 5880 [10], Silicon Oxide [20] and Quartz [21]. From the comparison of the proposed and existing model,



Fig. 6. VSWR comparison for different length of the patch antenna

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6



Fig. 7. Transmission (a) and reflection (b) coefficients for the proposed model

	Proposed optimized patch antenna	Palanivel Rajan and Vivek [23]	Darboe et al. [24]	Ghosh and Mitra [25]	Sirmaci et al. [26]
Substrate	Bakelite	FR4	Roger RT Duroid 5880	Silicon Oxide	Quartz
Size, mm ²	0.15 × 0.18	8×8	6.285 × 7.235		0.18 × 0.212
Patch size, mm ²	0.90 × 0.120	1.025×1.58	3.4 × 4.1	0.136 × 0.189	0.92 × 0.152
Resonant frequency, THz	1.11	0.074	0.028	0.46	1.08
RL, dB	-72.54	-15	-13.48	-17.08	-55
VSWR	1.5646	1.148	1.5376	1.024	1.00
Gain, dB	15.25	10.81	6.63	9.64	3.57

Table 2. Comparison of proposed and existing micro strip patch antenna

the attained parameter values of the model are better than the existing antenna model.

Conclusion

Using the Ansys HFSS tool, the design and analysis of the MPA are implemented and evaluated. The bakelite material serves as the substrate for the design of the MPA and the patch antenna length is determined using the Fennec Fox optimization method. To increase the bandwidth of the developed model, the SSRR is employed as the metamaterial. The designed model is evaluated by resonant frequency, return loss, gain, and VSWR. These

References

- Kim G., Kim S. Design and analysis of dual polarized broadband microstrip patch antenna for 5G mmWave antenna module on FR4 substrate. *IEEE Access*, 2021, vol. 9, pp. 64306–64316. https://doi. org/10.1109/access.2021.3075495
- Acıkaya F.C., Yıldırım B.S. A dual-band microstrip patch antenna for 2.45/5-GHz WLAN applications. *AEU-International Journal of Electronics and Communications*, 2021, vol. 141, pp. 153957. https:// doi.org/10.1016/j.aeue.2021.153957
- Davoudabadifarahani H., Ghalamkari B. High efficiency miniaturized microstrip patch antenna for wideband terahertz communications applications. *Optik*, 2019, vol. 194, pp. 163118. https://doi. org/10.1016/j.ijleo.2019.163118
- Alsawaf H.A. High gain of rectangular microstrip patch array in wireless microphones applications. *Lecture Notes in Networks and*

evaluated values are compared with the existing techniques with different patch size and substrate, such as FR4, Roger RT Duroid 5880, Silicon Oxide and Quartz. The attained RL values of the proposed and existing model are -72.54, -15, -13.48, -17.08 and -55. Likewise, the resonant frequency, gain and VSWR of the proposed and existing model are evaluated and compared. Based on these attained values, the proposed model results in greater values than the existing designed MPA. Thus, the design of MPA using Fennec Fox optimization with SSRR metamaterial performs better than the existing metamaterial based MPA. In future, the designed MPA can reduce more RL and enhance the resonant frequency with maximum gain.

Литература

- Kim G., Kim S. Design and analysis of dual polarized broadband microstrip patch antenna for 5G mmWave antenna module on FR4 substrate // IEEE Access. 2021. V. 9. P. 64306–64316. https://doi. org/10.1109/access.2021.3075495
- Acıkaya F.C., Yıldırım B.S. A dual-band microstrip patch antenna for 2.45/5-GHz WLAN applications // AEU-International Journal of Electronics and Communications. 2021. V. 141. P. 153957. https:// doi.org/10.1016/j.aeue.2021.153957
- Davoudabadifarahani H., Ghalamkari B. High efficiency miniaturized microstrip patch antenna for wideband terahertz communications applications // Optik. 2019. V. 194. P. 163118. https://doi. org/10.1016/j.ijleo.2019.163118
- 4. Alsawaf H.A. High gain of rectangular microstrip patch array in wireless microphones applications // Lecture Notes in Networks and

Systems, 2022, vol. 430, pp. 503-517. https://doi.org/10.1007/978-981-19-0825-5_54

- Kanade T.K., Rastogi A., Mishra S., Chaudhari V.D. Analysis of rectangular microstrip array antenna fed through microstrip lines with change in width. *Advances in Intelligent Systems and Computing*, 2022, vol. 1354, pp. 487–496. https://doi.org/10.1007/978-981-16-2008-9_46
- Thorat S.S., Chougule S.R. Design and investigation of compact microstrip patch array antennas for narrowband applications. *Advances in Intelligent Systems and Computing*, 2020, vol. 1089, pp. 105–116. https://doi.org/10.1007/978-981-15-1483-8 10
- Gnanamurugan S., Sivakumar P. Performance analysis of rectangular microstrip patch antenna for wireless application using FPGA. *Microprocessors and Microsystems*, 2019, vol. 68, pp. 11–16. https:// doi.org/10.1016/j.micpro.2019.04.006
- Mishra R., Mishra R.G., Chaurasia R.K., Shrivastava A.K. Design and analysis of microstrip patch antenna for wireless communication. *International Journal of Innovative Technology and Exploring Engineering*, 2019, vol. 8, no. 7, pp. 663–666.
- Ezzulddin S.K., Hasan S.O., Ameen M.M. Microstrip patch antenna design, simulation and fabrication for 5G applications. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 2022, vol. 116, pp. 102497. https:// doi.org/10.1016/j.simpat.2022.102497
- Sandhiyadevi P., Baranidharan V., Mohanapriya G.K., Roy J.R., Nandhini M. Design of Dual-band low profile rectangular microstrip patch antenna using FR4 substrate material for wireless applications. *Materials Today: Proceedings*, 2021, vol. 45, pp. 3506–3511. https:// doi.org/10.1016/j.matpr.2020.12.957
- Geetharamani G., Aathmanesan T. Design of metamaterial antenna for 2.4 GHz WiFi applications. *Wireless Personal Communications*, 2020, vol. 113, no. 4, pp. 2289–2300. https://doi.org/10.1007/s11277-020-07324-z
- Lavadiya S.P., Patel S.K., Maria R. High gain and frequency reconfigurable copper and liquid metamaterial tooth based microstrip patch antenna. *AEU-International Journal of Electronics and Communications*, 2021, vol. 137, pp. 153799. https://doi. org/10.1016/j.aeue.2021.153799
- Pattar D., Dongaokar P., Nisha S.L. Metamaterial for design of Compact Microstrip Patch Antenna. Proc. of the 2020 IEEE Bangalore Humanitarian Technology Conference (B-HTC), 2020, pp. 1–4. https://doi.org/10.1109/b-htc50970.2020.9297830
- Rajak N., Chattoraj N., Mark R. Metamaterial cell inspired high gain multiband antenna for wireless applications. *AEU-International Journal of Electronics and Communications*, 2019, vol. 109, pp. 23– 30. https://doi.org/10.1016/j.aeue.2019.07.003
- Vani H.R., Goutham M.A., Paramesha. Gain enhancement of microstrip patch antenna using metamaterial superstrate. *The Applied Computational Electromagnetics Society Journal (ACES)*, 2019, vol. 34, no. 8, pp. 1250–1253.
- Sağık M., Altıntaş O., Ünal E., Özdemir E., Demirci M., Çolak Ş., Karaaslan M. Optimizing the gain and directivity of a microstrip antenna with metamaterial structures by using artificial neural network approach. *Wireless Personal Communications*, 2021, vol. 118, no. 1, pp. 109–124. https://doi.org/10.1007/s11277-020-08004-8
- Guttula R., Nandanavanam V.R., Satyanarayana V. Design and optimization of microstrip patch antenna via improved metaheuristic algorithm. *Wireless Personal Communications*, 2021, vol. 120, no. 2, pp. 1721–1739. https://doi.org/10.1007/s11277-021-08531-y
- Suraj P., Behera B.R., Badhai R.K. Optimization of metamaterialsbased Wi-Fi antenna using genetic algorithm. *National Academy Science Letters*, 2020, vol. 43, no. 4, pp. 333–337. https://doi. org/10.1007/s40009-020-00876-5
- Shamim S.M., Uddin M.S., Hasan M.R., Samad M. Design and implementation of miniaturized wideband microstrip patch antenna for high-speed terahertz applications. *Journal of Computational Electronics*, 2021, vol. 20, no. 1, pp. 604–610. https://doi.org/10.1007/ s10825-020-01587-2
- Singh A., Mehra R.M., Pandey V.K. Design and optimization of microstrip patch antenna for UWB applications using Moth–Flame optimization algorithm. *Wireless Personal Communications*, 2020, vol. 112, no. 4, pp. 2485–2502. https://doi.org/10.1007/s11277-020-07160-1
- Trojovská E., Dehghani M., Trojovský P. Fennec fox optimization: A new nature-inspired optimization algorithm. *IEEE Access*, 2022, vol. 10, pp. 84417–84443. https://doi.org/10.1109/ access.2022.3197745

Systems. 2022. V. 430. P. 503–517. https://doi.org/10.1007/978-981-19-0825-5 54

- Kanade T.K., Rastogi A., Mishra S., Chaudhari V.D. Analysis of rectangular microstrip array antenna fed through microstrip lines with change in width // Advances in Intelligent Systems and Computing. 2022. V. 1354. P. 487–496. https://doi.org/10.1007/978-981-16-2008-9 46
- Thorat S.S., Chougule S.R. Design and investigation of compact microstrip patch array antennas for narrowband applications // Advances in Intelligent Systems and Computing. 2020. V. 1089. P. 105–116. https://doi.org/10.1007/978-981-15-1483-8_10
- Gnanamurugan S., Sivakumar P. Performance analysis of rectangular microstrip patch antenna for wireless application using FPGA // Microprocessors and Microsystems. 2019. V. 68. P. 11–16. https://doi. org/10.1016/j.micpro.2019.04.006
- Mishra R., Mishra R.G., Chaurasia R.K., Shrivastava A.K. Design and analysis of microstrip patch antenna for wireless communication // International Journal of Innovative Technology and Exploring Engineering, 2019. V. 8. N 7. P. 663–666.
- Ezzulddin S.K., Hasan S.O., Ameen M.M. Microstrip patch antenna design, simulation and fabrication for 5G applications // Simulation Modelling Practice and Theory. 2022. V. 116. P. 102497. https://doi. org/10.1016/j.simpat.2022.102497
- Sandhiyadevi P., Baranidharan V., Mohanapriya G.K., Roy J.R., Nandhini M. Design of Dual-band low profile rectangular microstrip patch antenna using FR4 substrate material for wireless applications // Materials Today: Proceedings. 2021. V. 45. P. 3506–3511. https:// doi.org/10.1016/j.matpr.2020.12.957
- Geetharamani G., Aathmanesan T. Design of metamaterial antenna for 2.4 GHz WiFi applications // Wireless Personal Communications. 2020. V. 113. N 4. P. 2289–2300. https://doi.org/10.1007/s11277-020-07324-z
- Lavadiya S.P., Patel S.K., Maria R. High gain and frequency reconfigurable copper and liquid metamaterial tooth based microstrip patch antenna // AEU-International Journal of Electronics and Communications. 2021. V. 137. P. 153799. https://doi.org/10.1016/j. aeue.2021.153799
- Pattar D., Dongaokar P., Nisha S.L. Metamaterial for design of Compact Microstrip Patch Antenna // Proc. of the 2020 IEEE Bangalore Humanitarian Technology Conference (B-HTC). 2020. P. 1–4. https://doi.org/10.1109/b-htc50970.2020.9297830
- Rajak N., Chattoraj N., Mark R. Metamaterial cell inspired high gain multiband antenna for wireless applications // AEU-International Journal of Electronics and Communications. 2019. V. 109. P. 23–30. https://doi.org/10.1016/j.aeue.2019.07.003
- Vani H.R., Goutham M.A., Paramesha. Gain enhancement of microstrip patch antenna using metamaterial superstrate // The Applied Computational Electromagnetics Society Journal (ACES). 2019. V. 34. N 8. P. 1250–1253.
- Sağık M., Altıntaş O., Ünal E., Özdemir E., Demirci M., Çolak Ş., Karaaslan M. Optimizing the gain and directivity of a microstrip antenna with metamaterial structures by using artificial neural network approach // Wireless Personal Communications. 2021. V. 118. N 1. P. 109–124. https://doi.org/10.1007/s11277-020-08004-8
- Guttula R., Nandanavanam V.R., Satyanarayana V. Design and optimization of microstrip patch antenna via improved metaheuristic algorithm // Wireless Personal Communications. 2021. V. 120. N 2. P. 1721–1739. https://doi.org/10.1007/s11277-021-08531-y
- Suraj P., Behera B.R., Badhai R.K. Optimization of metamaterialsbased Wi-Fi antenna using genetic algorithm // National Academy Science Letters. 2020. V. 43. N 4. P. 333–337. https://doi.org/10.1007/ s40009-020-00876-5
- Shamim S.M., Uddin M.S., Hasan M.R., Samad M. Design and implementation of miniaturized wideband microstrip patch antenna for high-speed terahertz applications // Journal of Computational Electronics. 2021. V. 20. N 1. P. 604–610. https://doi.org/10.1007/ s10825-020-01587-2
- Singh A., Mehra R.M., Pandey V.K. Design and optimization of microstrip patch antenna for UWB applications using Moth–Flame optimization algorithm // Wireless Personal Communications. 2020. V. 112. N 4. P. 2485–2502. https://doi.org/10.1007/s11277-020-07160-1
- Trojovská E., Dehghani M., Trojovský P. Fennec fox optimization: A new nature-inspired optimization algorithm // IEEE Access. 2022. V. 10. P. 84417–84443. https://doi.org/10.1109/access.2022.3197745
- 22. Siddiky A.M., Faruque M.R.I., Islam M.T., Abdullah S. A multi-split based square split ring resonator for multiband satellite applications

- 22. Siddiky A.M., Faruque M.R.I., Islam M.T., Abdullah S. A multi-split based square split ring resonator for multiband satellite applications with high effective medium ratio. *Results in Physics*, 2021, vol. 22, pp. 103865. https://doi.org/10.1016/j.rinp.2021.103865
- Palanivel Rajan S., Vivek C. Analysis and design of microstrip patch antenna for radar communication. *Journal of Electrical Engineering* & *Technology*, 2019, vol. 14, no. 2, pp. 923–929. https://doi. org/10.1007/s42835-018-00072-y
- Darboe O., Konditi D.B.O., Manene F. A 28 GHz rectangular microstrip patch antenna for 5G applications. *International Journal* of Engineering Research and Technology, 2019, vol. 12, no. 6, pp. 854–857.
- pp. 854–857.
 25. Ghosh J., Mitra D. Mutual coupling reduction in planar antenna by graphene metasurface for THz application. *Journal of Electromagnetic Waves and Application*, 2017, vol. 31, no. 18, pp. 2036–2045. ttps://doi.org/10.1080/09205071.2016.1277959
- Sirmaci Y.D., Akin C.K., Sabah C. Fishnet based metamaterial loaded THz patch antenna. *Optical and Quantum Electronics*, 2016, vol. 48, no. 2, pp. 168. https://doi.org/10.1007/s11082-016-0449-6

Authors

Sangeeta Kumari — M.Tech, Assistant Professor, BIT Sindri, Sindri, 828123, India, https://orcid.org/0009-0006-8456-2167, sangeeta.ece@bitsindri.ac.in

Arvind Kumar — PhD, Associate Professor, BIT Sindri, Sindri, 828123, India, se 58367526100, https://orcid.org/0000-0002-4716-3582, arvindkr. ece@bitsindri.ac.in

Ettiyappan Anbalagan — PhD, Professor, Saveetha School of Engineering, Saveetha Institute of Medical and Technical Sciences, Chennai, 600095, India, sc 58259257500, https://orcid.org/0000-0002-5727-0605, eanbalagan77@gmail.com

Kiran Kumar Thoti — PhD, Senior Lecturer, University Malaysia Kelantan, Kota Bharu, 16100, Malaysia, sc 58069030700, https://orcid. org/0000-0002-6678-9425, kirankumar3561@gmail.com

Manoj Sharma — PhD, Associate Professor, Manipal University Jaipur, Jaipur, 303007, India, se 57219291960, https://orcid.org/0000-0003-2886-4217, m0918.sharma@gmail.com

Received 26.07.2023 Approved after reviewing 12.10.2023 Accepted 10.11.2023 with high effective medium ratio // Results in Physics. 2021. V. 22. P. 103865. https://doi.org/10.1016/j.rinp.2021.103865

- Palanivel Rajan S., Vivek C. Analysis and design of microstrip patch antenna for radar communication // Journal of Electrical Engineering & Technology. 2019. V. 14. N 2. P. 923–929. https://doi.org/10.1007/ s42835-018-00072-y
- Darboe O., Konditi D.B.O., Manene F. A 28 GHz rectangular microstrip patch antenna for 5G applications // International Journal of Engineering Research and Technology. 2019. V. 12. N 6. P. 854– 857.
- Ghosh J., Mitra D. Mutual coupling reduction in planar antenna by graphene metasurface for THz application // Journal of Electromagnetic Waves and Application. 2017. V. 31. N 18. P. 2036– 2045. ttps://doi.org/10.1080/09205071.2016.1277959
- Sirmaci Y.D., Akin C.K., Sabah C. Fishnet based metamaterial loaded THz patch antenna // Optical and Quantum Electronics. 2016. V. 48. N 2. P. 168. https://doi.org/10.1007/s11082-016-0449-6

Авторы

Кумари Сангита — М. Tech, доцент, БИТ Синдри, Синдри, 828123, Индия, https://orcid.org/0009-0006-8456-2167, sangeeta.ece@bitsindri. ac.in

Кумар Арвинд — PhD, доцент, БИТ Синдри, Синдри, 828123, Индия, sc 58367526100, https://orcid.org/0000-0002-4716-3582, arvindkr.ece@ bitsindri.ac.in

Анбалаган Эттияппан — PhD, профессор, Инженерная школа Савиты, Институт медицинских и технических наук Саветы, Ченнай, 600095, Индия, sc 58259257500, https://orcid.org/0000-0002-5727-0605, eanbalagan77@gmail.com

Кумар Тоти Киран — PhD, преподаватель, Государственный университет в Келантане, Кота-Бару, 16100, Малайзия, вс 58069030700, https://orcid.org/0000-0002-6678-9425, kirankumar3561@gmail.com

Шарма Манодж — PhD, доцент, Университет Манипал в Джайпуре, Джайпур, 303007, Индия, sc 57219291960, https://orcid.org/0000-0003-2886-4217, m0918.sharma@gmail.com

Статья поступила в редакцию 26.07.2023 Одобрена после рецензирования 12.10.2023 Принята к печати 10.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» I/İTMO

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November–December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

NHOOPMAUNOHHIJIX TEXHONOFINÄ, MEXAHNKN N ONTUKN

университет итмо

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1214-1222 УДК 004.942, 519.8, 658.51

Алгоритм оперативного поддержания температурного режима блоков усиления мощности передающего комплекса радиолокационной станции на основе тепловой модели

Роман Сергеевич Шафир¹, Марина Александровна Давыдова², Максим Олегович Корпусов³, Анатолий Юрьевич Перлов⁴, Александр Васильевич Тимошенко⁵⊠

1.3 Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы, Москва, 117198, Российская Федерация

2.3 Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, 119991, Российская Федерация

⁴ Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», Москва, 124498, Российская Федерация

⁵ АО «Радиотехнический институт имени А.Л. Минца», Москва, 127083, Российская Федерация

¹ romanshafir@mail.ru, https://orcid.org/0009-0000-0877-7533

² m.davydova@physics.msu.ru, https://orcid.org/0000-0002-9255-7353

³ korpusov@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5336-4559

⁴ laperlov@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-8480-3772

⁵ u567ku78@gmail.com^{\Box}, https://orcid.org/0000-0002-9791-142X

Аннотация

Введение. Тенденции развития современной радиоэлектронной аппаратуры, входящей в состав радиолокационных станций, заключаются в постоянном увеличении выходной излучаемой мощности. Это приводит к значительному повышению тепловыделения блоков усиления мощности как наиболее теплонагруженных. Для уменьшения отказов данных блоков, связанных с перегревом, предложен оригинальный алгоритм оперативного поддержания температурного режима. В основе алгоритма лежит тепловая модель, позволяющая, в отличие от известных моделей, производить расчет распределения температуры в блоке в режиме реального времени с учетом телеметрии с датчиков температуры, установленных внутри блока. Новизна предлагаемого алгоритма заключается в управлении системой охлаждения в реальном масштабе времени на основе прогноза температуры блоков, полученного с помощью тепловой модели. Метод. Тепловая модель базируется на математической формализации тепловых процессов с использованием метода анизотропного тела, который позволяет минимизировать вычислительные затраты на расчеты за счет представления блока усиления мощности в виде квазиоднородного тела. Основные результаты. Моделирование процесса распределения температуры в блоке усиления мощности выполнено в среде COMSOL. Для оценки эффективности алгоритма и возможности работы в режиме реального времени на этапе эксплуатации радиолокационной станции выполнен вычислительный эксперимент с использованием модельных данных. Результаты моделирования подтвердили возможность проведения вычислений распределения температуры в блоке в реальном масштабе времени. Обсуждение. В отличие от существующих алгоритмов поддержания температурного режима блока, основанных на показаниях температурных датчиков, определяющих температуру в текущий момент времени, разработанный алгоритм реализует прогноз температуры. Это позволяет принимать меры по охлаждению блока до наступления критических аварийных ситуаций.

Ключевые слова

тепловая модель, радиоэлектронный комплекс, блок усиления мощности, воздушное охлаждение

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-11-00056).

Ссылка для цитирования: Шафир Р.С., Давыдова М.А., Корпусов М.О., Перлов А.Ю., Тимошенко А.В. Алгоритм оперативного поддержания температурного режима блоков усиления мощности передающего комплекса радиолокационной станции на основе тепловой модели // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1214–1222. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1214-1222

© Шафир Р.С., Давыдова М.А., Корпусов М.О., Перлов А.Ю., Тимошенко А.В., 2023

Algorithm for promptly maintaining the temperature regime of power amplification units of the radar transmitting complex based on a thermal model Roman S. Shafir¹, Marina A. Davydova², Maxim O. Korpusov³, Anatoly Yu. Perlov⁴, Alexander V. Timoshenko⁵

- 1.3 Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba, Moscow, 117198, Russian Federation
- 2,3 Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991, Russian Federation
- ⁴ National Research University MIET, Moscow, 124498, Russian Federation
- ⁵ JSC "Academician A.L.Mints Radiotechnical Institute", Moscow, 127083, Russian Federation
- ¹ romanshafir@mail.ru, https://orcid.org/0009-0000-0877-7533
- ² m.davydova@physics.msu.ru, https://orcid.org/0000-0002-9255-7353
- ³ korpusov@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-5336-4559
- ⁴ laperlov@yandex.ru, https://orcid.org/0000-0001-8480-3772
- ⁵ u567ku78@gmail.com^{\[\]}, https://orcid.org/0000-0002-9791-142X

Abstract

The development trends of modern electronic equipment included in radar stations consist of a constant increase in the output radiated power. This leads to a significant increase in heat generation of power amplification units as the most heat-loaded ones. To reduce failures of these units associated with overheating, this work proposes an original algorithm for quickly maintaining the temperature regime. The algorithm is based on a thermal model, which allows, unlike the known ones, to calculate the temperature distribution in the block in real time, taking into account telemetry from temperature sensors installed inside the block. The novelty of the proposed algorithm lies in the real-time control of the cooling system based on the block temperature forecast obtained using a thermal model. The thermal model is based on the mathematical formalization of thermal processes using the anisotropic body method, which allows minimizing the computational costs of calculations by representing the power amplification unit as a quasi-homogeneous body. Simulation of the temperature distribution process in the power amplification unit was performed in the COMSOL. To evaluate the efficiency of the algorithm and the ability to operate in real time at the operational stage of the radar station, a computational experiment was performed using model data. The simulation results confirmed the possibility of calculating the temperature distribution in the block in real time. Unlike existing algorithms for maintaining the temperature regime of a block, based on the readings of temperature sensors that determine the temperature at the current moment in time, the developed algorithm implements a temperature forecast. This allows you to take measures to cool the unit before the onset of critical emergency situations.

Keywords

Thermal model, radio-electronic complex, power amplification unit, air cooling

Acknowledgements

The work was supported by the Russian Science Foundation (grant No. 23-11-00056).

For citation: Shafir R.S., Davydova M.A., Korpusov M.O., Perlov A.Yu., Timoshenko A.V. Algorithm for promptly maintaining the temperature regime of power amplification units of the radar transmitting complex based on a thermal model. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1214–1222 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1214-1222

Введение

Современные высокопотенциальные радиолокационные станции мониторинга космического пространства (РЛС МКП) представляют собой многоэлементные цифровые системы с большим количеством радиоэлектронной аппаратуры, функционирующей на высоком уровне мощности с низкой скважностью и большой длительностью радиоимпульса. Для таких энергонапряженных режимов крайне важно обеспечить необходимый температурный режим в передающем радиоэлектронном комплексе, при котором выполняются исключительно высокие требования по надежности.

В настоящее время при проектировании систем охлаждения РЛС МКП широко применяются тепловые модели [1], реализованные в различных системах автоматизированного проектирования (САПР) [2–9]. Тепловые модели, рассмотренные в работах [1–9], позволяют достаточно точно рассчитать потенциально возможные температуры элементов радиоэлектронной аппаратуры на стадии проектирования. Отметим, что применение данных моделей в режиме реального времени и с учетом реальных условий функционирования РЛС невозможно в силу длительного времени расчета и больших вычислительных затрат.

Тепловая модель, предложенная в работе [10], позволяет производить оперативное вычисление температур блоков усиления мощности в предположении, что температура распределена по блоку равномерно, что, как правило, не соответствует реальным условиям функционирования РЛС.

В работе [11] рассмотрена тепловая модель нагрева контактирующих элементов (их аналоги в нашем случае — блоки усиления мощности), которая учитывает неравномерное распределение температуры по элементам. Однако данная модель не может лечь в основу управления системой теплоотвода в силу работы с постоянными параметрами, не отражающими текущую тепловую динамику внутри радиоэлектронного комплекса, поскольку основной параметр данной модели — температура окружающей среды (воздуха) принимается постоянной величиной.

В настоящей работе для решения задачи оперативного поддержания температурного режима блоков усиления мощности (при котором минимизируются затраты энергии на работу системы охлаждения и одновременно не допускается перегрев радиоэлектронной аппаратуры) предложен следующий подход: параметры, которые изменяются в процессе работы радиоэлектронной аппаратуры в узком диапазоне или совсем не изменяются, принимаются как постоянные, а для определения параметров, которые меняются в широком диапазоне, могут использоваться показания датчиков.

Вследствие того, что количество блоков усиления мощности в составе только одного радиоэлектронного комплекса достигает нескольких сотен, расчет параметров тепловой модели в режиме реального времени фактически не реализуем. Одним из возможных вариантов решения данной задачи является применение технологии параллельных (многопроцессорных) вычислений [12, 13]. Данный метод предполагает, что каждый процессор будет рассчитывать в режиме реального времени температурное распределение только своего блока, либо группы блоков, что исключает необходимость последовательного проведения расчетов для всех блоков (либо группы самых теплонапряженных блоков) на одном процессоре.

Таким образом, актуальным направлением исследований является разработка тепловой модели, которая должна отвечать жестким требованиям оперативности проведения вычислений. Данная модель должна лечь в основу алгоритма поддержания температурного режима блоков в режиме реального времени.

Алгоритм оперативного поддержания температурного режима блоков усиления мощности с помощью тепловой модели

Алгоритм поддержания температурного режима блоков должен быть основан на тепловой модели. Порядок разработки тепловой модели представлен на рис. 1.

В качестве основных физических процессов рассмотрим процессы теплопроводности и конвекции,



Рис. 1. Порядок разработки тепловой модели

Fig. 1. Procedure for developing a thermal model

при этом величину излучения, полученную с поверхности блока усиления мощности, учитывать не будем. Примем, что поверхность блока охлаждается за счет конвективного теплообмена с воздухом.

Рассмотрим более подробно этап «Разработка математической модели» (рис. 1). Для построения тепловой модели блока за основу возьмем уравнение теплопроводности, описывающее нестационарные процессы теплообмена:

$$c(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})\frac{\partial T(\mathbf{r},t)}{dt} = \nabla(k(\mathbf{r})\nabla T(\mathbf{r},t)) + F_{\text{HCT}}(\mathbf{r},t), \, \mathbf{r} \in \Omega,$$
$$0 < t \le T, \tag{1}$$

где $\mathbf{r} = (x, y, z)$ — радиус-вектор, проведенный из начала отсчета в точку наблюдения; $T(\mathbf{r}, t)$ — температурное поле в точке с радиус-вектором \mathbf{r} в момент времени t; $\rho(\mathbf{r})$ — плотность среды в точке с радиус-вектором \mathbf{r} ; $c(\mathbf{r})$ — удельная теплоемкость блока в точке с радиус-вектором \mathbf{r} ; $k(\mathbf{r})$ — коэффициент теплопроводности; $F_{\text{ист}}(\mathbf{r}, t)$ — плотность тепловых источников в точке с радиус-вектором \mathbf{r} в момент времени t; Ω — расчетная область.

Уравнение (1) учитывает: неоднородное распределение температуры внутри блока; зависимости удельной теплоемкости, плотности материала, коэффициента теплопроводности от координат *x*, *y*, *z*; зависимость плотности внутренних источников тепла от координат и времени.

Решение уравнения (1) с заданной точностью в случае сложной геометрии потребует значительных вычислительных затрат, что не позволит применять такую тепловую модель на этапе эксплуатации РЛС. Отметим, что дополнительная сложность данного уравнения нестационарность, обуславливающая зависимость температуры не только от координат, но и от времени.

В результате перечисленных причин примем следующие допущения:

- функциональные ячейки блока, имеющие сложную структуру, заменим на квазиоднородное анизотропное тело с эффективными значениями теплопроводности λ_x, λ_v, λ_z, по осям x, y, z [12];
- вместо нестационарного уравнения (1) рассмотрим его стационарный аналог;
- в качестве расчетной области рассмотрим прямоугольный параллелепипед: $\Omega = (0, L_x) \times (0, L_y) \times (0, L_z), L_x, L_y, L_z$ — размеры расчетной области;
- мощности тепловыделения будем считать равномерными по функциональным ячейкам блока.

С учетом данных допущений получим уравнение вида:

$$\lambda_{x}(x, y, z) \frac{\partial^{2} T(x, y, z)}{\partial x^{2}} + \lambda_{y}(x, y, z) \frac{\partial^{2} T(x, y, z)}{\partial y^{2}} + \lambda_{z}(x, y, z) \frac{\partial^{2} T(x, y, z)}{\partial z^{2}} + F_{\text{HCT}}(x, y, z) = 0, \qquad (2)$$
$$(x, y, z) \in \Omega$$

Рассмотрим для уравнения (2) краевую задачу:

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

$$\begin{split} & \left(\lambda_{x}(x, y, z) \frac{\partial^{2} T(x, y, z)}{\partial x^{2}} + \lambda_{y}(x, y, z) \frac{\partial^{2} T(x, y, z)}{\partial y^{2}} + \right. \\ & \left. + \lambda_{z}(x, y, z) \frac{\partial^{2} T(x, y, z)}{\partial z^{2}} + F_{\text{HCT}}(x, y, z) = 0, (x, y, z) \in \Omega, \\ & \left. \lambda_{x}(0, y, z) \frac{\partial T(0, y, z)}{\partial x} = \alpha(T(0, y, z) - T_{\text{okp}}), \\ & 0 \leq y \leq L_{y}, 0 \leq z \leq L_{z}, \\ & \left. - \lambda_{x}(L_{x}, y, z) \frac{\partial T(L_{x}, y, z)}{\partial x} = \alpha(T(L_{x}, y, z) - T_{\text{okp}}), \\ & 0 < y < L_{y}, 0 < z < L_{z}, \\ & \left. \lambda_{y}(x, 0, z) \frac{\partial T(x, 0, z)}{\partial y} = \alpha(T(x, 0, z) - T_{\text{okp}}), \\ & 0 \leq x \leq L_{x}, 0 < z < L_{z}, \\ & \left. - \lambda_{y}(x, L_{y}, z) \frac{\partial T(x, L_{y}, z)}{\partial y} = \alpha(T(x, L_{y}, z) - T_{\text{okp}}), \\ & 0 \leq x \leq L_{x}, 0 < z < L_{z}, \\ & \left. \lambda_{z}(x, y, 0) \frac{\partial T(x, y, 0)}{\partial z} = \alpha(T(x, y, 0) - T_{\text{okp}}), \\ & 0 < x < L_{x}, 0 < y < L_{y}, \\ & \left. - \lambda_{z}(x, y, L_{z}) \frac{\partial T(x, y, L_{z})}{\partial z} = \alpha(T(x, y, L_{z}) - T_{\text{okp}}), \\ & 0 < x < L_{x}, 0 < y < L_{y}, \\ \end{array} \right)$$

где а — коэффициент теплообмена блока с воздухом; $T_{\rm окр}$ — температура окружающей среды.

Второе–седьмое уравнения системы (3) представляют собой граничные условия третьего рода. Они описывают процесс теплообмена между блоком и окружающей средой (воздухом). Управляющими параметрами в данной системе являются параметры α и $T_{\rm окр}$. Коэффициент α зависит от многих факторов, в частности, от скорости потоков воздуха.

Отметим, что известная методика расчета коэффициентов λ_x , λ_y , λ_z [12] является полуэмпирической. Для более точного определения данных коэффициентов потребуется решение обратной задачи, которая заключается в том, чтобы на основе телеметрических данных с макета блока по известным значениям температур его элементов определить неизвестные параметры λ_x , λ_y , λ_z . Данная процедура в настоящей работе не проводилась и относится к дальнейшим исследованиям.

На рис. 2 показан алгоритм оперативного поддержания температурного режима блоков усиления мощности на основе тепловой модели.

При изменении телеметрии по полученным значениям температур блоков (в случае повышения температуры на датчиках, расположенных на основных тепловыделяющих элементах блока) решается краевая задачу (3) в режиме реального времени на основе уточненных параметров. В качестве параметров, которые необходимо уточнить в режиме реального времени, выбраны параметры *T*_{окр} и α. Параметр *T*_{окр} может быть определен с помощью датчика, расположенного на корпусе блока и измеряющего температуру воздуха. Параметр α рассчитывается по эмпирическим формулам. Для уточнения данного параметра можно использовать датчик, измеряющий скорость воздуха вблизи поверхности блока, которая оказывает существенное влияние на данный коэффициент. По результатам решения краевой задачи (3) вычисляется распределение температуры внутри блока усиления мощности (при выходе на стационарный режим). В случае прогноза перегрева блока $(T \ge T_{\rm KD},$ где $T_{\rm KD}$ — критическое значение температуры блока усиления мощности) необходимо увеличить скорость потока охлаждающего воздуха или снизить температуру воздуха. Если данные меры не обеспечивают достаточного охлаждения блока, то через некоторое время при приближении температуры блока к критической его требуется принудительно отключить до момента остывания (в противном случае блок может выйти из строя). В случае снятия перегрева блока выполняется контроль его температуры в штатном режиме.

Для оценки эффективности (и возможности) реализации данного алгоритма на практике проведем вычислительный эксперимент.

Вычислительный эксперимент

Для проведения расчетов с целью оценки эффективности разработанной тепловой модели, а также проверки возможности проведения вычислений в режиме реального времени использованы данные типового блока усиления мощности с упорядоченным расположением узлов и элементов [14]. Расчеты выполним с использованием пакета программного обеспечения COMSOL Multiphysics с помощью метода конечных элементов.

В качестве исходных данных для первого вычислительного эксперимента выберем следующий набор входных параметров: $L_x = 156$ мм, $L_y = 49$ мм и $L_z = 75$ мм — размеры блока по осям x, y и z, $\lambda_x = 0,11$ Вт/(м·К); $\lambda_y = 0,21$ Вт/(м·К); $\lambda_z = 0,11$ Вт/(м·К); $T_{\rm кp} = 85$ °C; суммарное тепловыделение 10 Вт. Введем обозначение:

$$T_{\max} = \max\{T_i | i = \overline{1, N}\},\$$

где T_i — расчетное значение температуры в *i*-ом узле сетки; N — количество узлов сетки.

При расчетах необходимо добиться выполнения условия:

$$T_{\max} < T_{\kappa p}.$$
 (4)

Для первого вычислительного эксперимента выберем температуру окружающего воздуха $T_{\rm okp} = 40$ °C, что соответствует температуре воздуха в радиоэлектронном комплексе при теплонапряженном режиме работы. Результаты расчета представлены на рис. 3, *а*–*с*. При этом атмосферное давление при расчетах считалось нормальным.

Максимальные (T_{max}) и минимальные (T_{min}) значения температур показаны сверху и снизу вертикальной температурной шкалы.

На рис. 3, *а* показано распределение температуры в случае, когда скорость потоков воздуха равна нулю. В результате первого эксперимента видно, что условие



Puc. 2. Алгоритм оперативного поддержания температурного режима блоков усиления мощности на основе тепловой модели *Fig.* 2. Algorithm for quickly maintaining the temperature regime of power amplification units based on a thermal model



Puc. 3. Распределение температуры по блоку при *T*_{окр} = 40 °C при различных режимах конвекции: при естественной конвекции (*a*), при скорости воздуха 0,5 м/с (*b*), при скорости воздуха 0,8 м/с (*c*)

Fig. 3. Temperature distribution throughout the block at $T_{air} = 40$ °C under various convection modes: with natural convection (*a*), at an air speed of 0.5 m/s (*b*), at an air speed of 0.8 m/s (*c*)


Puc. 4. Распределение температуры по блоку при $T_{okp} = 30$ °C при различных режимах конвекции: при естественной конвекции (*a*), при скорости воздуха 0,5 м/с (*b*), при скорости воздуха 0,8 м/с (*c*)

Fig. 4. Temperature distribution throughout the block at $T_{air} = 30$ °C under various convection modes: with natural convection (*a*), at an air speed of 0.5 m/s (*b*), at an air speed of 0.8 m/s (*c*)

(4) выполняется только в случае рис. 3, *с* и с небольшим запасом, что на практике может не гарантировать отсутствие перегрева для блока в силу невысокой точности модели.

Рассмотрим случай функционирования блока при более низкой температуре окружающего воздуха $T_{\rm okp} = 30$ °C. Результаты расчета приведены на рис. 4. Скорость потоков воздуха совпадает со случаями на рис. 3, *a*-*c*. Максимальные ($T_{\rm max}$) и минимальные ($T_{\rm min}$) значения температур показаны сверху и снизу вертикальной температурной шкалы.

В случае использования более низкой температуры условие (4) выполняется на рис. 4, *b*, *c*, но на рис. 4, *b*

Таблица. Результаты расчета максимальной температуры внутри блока усиления мощности при различных входных параметрах

Table. Results of calculating the maximum temperature inside the block for various input parameters

$T_{\rm окр}$, °С	Скорость потоков воздуха (v), м/с	$T_{\rm max}$, °C
40	0	92,8
40	0,5	88,0
40	0,8	80,0
30	0	82,0
30	0,5	77,9
30	0,8	69,9

с небольшим запасом. Исходя из этого, более надежным для обеспечения выполнения условия (4) является набор параметров случая, изображенным на рис. 4, *c*).

Результаты расчета при различных входных параметрах представлены в таблице.

Отметим, что для применения предложенной модели в режиме реального времени при расчетах должны быть использованы показания с датчиков по температуре окружающего воздуха и скорости потоков воздуха. В настоящей работе при расчетах эти значения задавались вручную.

Для проверки возможности работы модели в режиме реального времени оценим время, затрачиваемое на проведение расчетов. Оно значительно меньше одной секунды.

При проведении первого вычислительного эксперимента коэффициенты теплопроводности по координатам *x*, *y*, *z* считались постоянными по всему блоку.

Для проведения второго вычислительного эксперимента рассмотрим блок усиления мощности более сложной структуры (рис. 5, *a*).

Габариты блока усиления мощности аналогичны параметрам, используемым при первом моделировании. Цифрами 1–4 на рис. 5, а обозначены области, в которых коэффициенты теплопроводности считаются постоянными. При этом цифрами 1–3 отмечены области с функциональными ячейками, а цифрой 4 обозначен алюминиевый радиатор.

Для проведения расчета выбраны следующие значения коэффициентов тепловодности: $\lambda_{1,x} = 0.11$ Вт/(м·К),



Puc. 5. Модель блока (*a*) и распределение температуры (*b*) внутри блока при втором вычислительном эксперименте *Fig. 5.* Block model (*a*) and temperature distribution (*b*) inside the block during the second computational experiment

 $\begin{array}{l} \lambda_{1,y} = 0.21 \ \mathrm{Bt/(M \cdot K)}, \ \lambda_{1,z} = 0.11 \ \mathrm{Bt/(M \cdot K)}, \ \lambda_{2,x} = \\ = 0.2 \ \mathrm{Bt/(M \cdot K)}, \ \lambda_{2,y} = 0.4 \ \mathrm{Bt/(M \cdot K)}, \ \lambda_{2,z} = 0.2 \ \mathrm{Bt/(M \cdot K)}, \ \lambda_{3,x} = \\ = 0.5 \ \mathrm{Bt/(M \cdot K)}, \ \lambda_{3,y} = 0.6 \ \mathrm{Bt/(M \cdot K)}, \ \lambda_{3,z} = 0.5 \ \mathrm{Bt/(M \cdot K)}. \end{array}$

При расчетах на всех поверхностях блока было задано граничное условие естественной конвекции. На радиаторе определено условие вынужденной конвекции при скорости воздуха 0,5 м/с (обдув идет снизу вверх), $T_{\rm окр} = 30$ °C, атмосферное давление считалось нормальным. Мощности тепловыделения для трех областей: P1 = 1 Вт, P2 = 1 Вт, P3 = 4 Вт.

Результаты расчета приведены на рис. 5, *b*. Время проведения данного расчета также намного меньше секунды, что позволило выполнить расчеты в режиме реального времени.

Отметим, что традиционные методы расчета, учитывающие сложную геометрию блока, дадут более точное, но не оперативное решение. Время проведения расчетов может занять как несколько минут, так и несколько часов в зависимости от подробности выбранной сетки. При этом, чем более сложная геометрия рассматривается, тем более подробная сетка будет нужна.

В настоящей работе при выборе сетки было учтено условие, что при дальнейшем ее сгущении температурное распределение существенно не изменяется.

Перспективным направлением для дальнейшего исследования представляется использование квазиравномерных сеток [15, 16], которые содержат большее число узлов в наиболее теплонапряженных областях блока усиления мощности. Данный подход позволит оптимизировать вычисления, поскольку в областях, где температура распределена по блоку практически равномерно не требуется брать большое количество узлов. Напротив, в наиболее теплонапряженных областях температура распределена по блоку неравномерно (присутствуют значительные температурные перепады), следовательно сетка должна быть там более подробной.

Заключение

Проведенный анализ известных тепловых моделей радиоэлектронной аппаратуры показал, что они обладают достаточной точностью за счет применения метода конечных элементов для теплового расчета сложной 3D-модели радиоэлектронной аппаратуры. Однако тепловые расчеты по таким моделям не будут оперативными, что не позволяет применять их на этапе эксплуатации радиолокационной станции для получения прогноза температур радиоэлектронной аппаратуры в режиме реального времени.

В работе рассмотрены подходы по получению оперативного температурного расчета. В качестве основного недостатка изученных научных работ отмечены грубые допущения (например, однородное распределение температуры по всему блоку), что не отражает реальную картину функционирования радиоэлектронной аппаратуры.

Разработанный алгоритм оперативного поддержания температурного режима блоков усиления мощности передающего комплекса радиолокационной станции на основе тепловой модели позволяет получать температурный прогноз для блоков в режиме реального времени, учитывая, при этом, специфику функционирования радиоэлектронной аппаратуры. Проведенный вычислительный эксперимент показал работоспособность и эффективность разработанного алгоритма.

Перспективным представляется использование технологии параллельных вычислений, то есть проведение вычислений прогнозных значений температур одновременно для всей совокупности блоков из состава передающего комплекса радиолокационной станции на нескольких процессорах. В этом случае при работе программы каждый процессор будет производить расчеты только своего блока (или группы блоков), что позволит значительно ускорить расчеты.

Реализация технологии параллельных вычислений для расчета температурных полей группы блоков и проверка возможности проведения данных вычислений в режиме реального времени требуют дальнейших исследований.

Литература

- Гойденко В.К. Комплексная тепловая модель программно-аппаратного комплекса связи // Системы управления, связи и безопасности. 2019. № 1. С. 141–157. https://doi.org/10.24411/2410-9916-2019-10108
- Михайлов М.В., Продан Н.В., Ренев М.Е. Численное моделирование газодинамики при работе широкодиапазонного ракетного сопла с пористой вставкой // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23. № 4. С. 836–842. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-4-836-842
- Тукмакова А.С., Демченко П.С., Тхоржевский И.Л., Новотельнова А.В., Ходзицкий М.К. Моделирование процесса стационарного термоотражения для измерения теплопроводности материалов // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22. № 6. С. 1216–1225. https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-6-1216-1225
- 4. Скибина Н.П. Численное исследование нестационарного течения газа в камере сгорания прямоточного воздушно-реактивного двигателя с учетом процесса теплообмена // Вычислительные технологии. 2020. Т. 25. № 6. С. 50–61. https://doi.org/10.25743/ ICT.2020.25.6.003
- 5. Дегтярев А.А., Молчанов А.В. Верификация расчета нагрева фюзеляжа беспилотного летательного аппарата реактивной струей турбореактивного двигателя // Вестник Концерна ВКО «Алмаз — Антей». 2020. № 3. С. 69–76. https://doi. org/10.38013/2542-0542-2020-3-69-76
- 6. Викулов А.Г. Математическое моделирование теплообмена в космических аппаратах // Вестник Концерна ВКО «Алмаз Антей». 2017. № 2. С. 61–78. https://doi.org/10.38013/2542-0542-2017-2-61-78
- Сухоруков М.П. Исследование и нахождение оптимальных тепловых моделей электрорадиоизделий радиоэлектронной аппаратуры // Интернет-журнал «Науковедение». 2017. Т. 9. № 6. Р. 102.
- Шалумов А.С., Першин Е.О., Шалумов М.А. АСОНИКА-М-ЭО: моделирование произвольных конструкций электроники на механические и тепловые воздействия // Автоматизация. Современные технологии. 2019. Т. 73. № 7. С. 291–300.
- Шалумов А.С., Чабриков С.В., Шалумов М.А. АСОНИКА-Т: анализ и обеспечение тепловых характеристик конструкций аппаратуры // Автоматизация. Современные технологии. 2018. Т. 72. № 7. С. 291–301.
- Тимошенко А.В., Перлов А.Ю., Гончаренко В.И., Ермаков А.В. Моделирование тепловых процессов в передающих комплексах радиолокационных станций мониторинга // Известия высших учебных заведений. Авиационная техника. 2021. № 4. С. 180–187.
- Аронов П.С., Галанин М.П., Родин А.С. Математическое моделирование контактного взаимодействия элементов твэла с учетом ползучести на основе mortar-метода // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2020. № 110. С. 1–24. https://doi.org/10.20948/ prepr-2020-110
- Ежова Н.А., Соколинский Л.Б. Обзор моделей параллельных вычислений // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Вычислительная математика и информатика. 2019. Т. 8. № 3. С. 58–91. https://doi.org/10.14529/cmse190304
- Спевак Л.Ф., Нефедова О.А. Численное решение двумерного нелинейного уравнения теплопроводности с использованием радиальных базисных функций // Компьютерные исследования и моделирование. 2022. Т. 14. № 1. С. 9–22. https://doi. org/10.20537/2076-7633-2022-14-1-9-22
- Дульнев Г.Н. Тепло- и массообмен в радиоэлектронной аппаратуре: учебник для вузов. М.: Высшая школа, 1984. 247 с.
- 15. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978. 512 с.
- 16. Альшин А.Б., Альшина Е.А., Болтнев А.А., Качер О.А., Корякин П.В. Численное решение начально-краевых задач для уравнений соболевского типа методом квазиравномерных сеток // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2004. Т. 44. № 3. С. 493–513.

References

- Goydenko V.K. Complex thermal model of communication hardware and software system. Systems of Control, Communication and Security, 2019, no. 1, pp. 141–157. (in Russian). https://doi. org/10.24411/2410-9916-2019-10108
- Mikhailov M.V., Prodan N.V., Renev M.E. Numerical simulation of gas dynamics during operation of a wide-range rocket nozzle with a porous insert. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 4, pp. 836– 842. (in Russian). https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-4-836-842
- Tukmakova A.S., Demchenko P.S., Tkhorzhevskiy I.L., Novotelnova A.V., Khodzitsky M.K. Simulating the process of steady-state thermoreflectance for measuring the thermal conductivity of materials. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 6, pp. 1216– 1225. (in Russian). https://doi.org/10.17586/2226-1494-2022-22-6-1216-1225
- Skibina N.P. Computational study of unsteady gas flow in the combustion chamber of a ramjet engine with heat transfer. *Computational Technologies*, 2020, vol. 5, no. 6, pp. 50–61. (in Russian). https://doi.org/10.25743/ICT.2020.25.6.003
- Degtyarev A.A., Molchanov A.V. Verification of calculations for heating the fuselage of an unmanned aerial vehicle with a jet stream of a turbojet engine. *Journal of "Almaz – Antey" Air and Space Defence Corporation*, 2020, no. 3, pp. 69–76. (in Russian). https:// doi.org/10.38013/2542-0542-2020-3-69-76
- Vikulov A.G. Mathematical simulation of heat transfer in spacecraft. Journal of "Almaz — Antey" Air and Space Defence Corporation, 2017, no. 2, pp. 61–78. (in Russian). https://doi.org/10.38013/2542-0542-2017-2-61-78
- 7. Sukhorukov M.P. Research and finding the optimal thermal models of electronic radio products of radio electronic equipment. *Naukovedenie*, 2017, vol. 9, no. 6, pp. 102. (in Russian)
- Shalumov A.S., Pershin E.O., Shalumov M.A. ASONIKA-M-3D: simulation of arbitrary electronic structures on mechanical and thermal effects. *Automation. Modern technologies*, 2019, vol. 73, no. 7, pp. 291–300. (in Russian)
- Shalumov A.C., Chabrikov S.V., Shalumov M.A. ASONIKA-T: analysis and ensuring of the apparatus thermal characteristics. *Automation. Modern technologies*, 2018, vol. 72, no. 7, pp. 291–301. (in Russian)
- Timoshenko A.V., Perlov A.Y., Goncharenko V.I., Ermakov A.V. Modeling of thermal processes in transmitting complexes of radar monitoring stations. *Russian Aeronautics*, 2021, vol. 64, no. 4, pp. 783–791. https://doi.org/10.3103/s1068799821040255
- Aronov P.S., Galanin M.P., Rodin A.S. Mathematical modeling of the contact interaction of the fuel element with creep using the mortarmethod. *Keldysh Institute Preprints*, 2020, no. 110, pp. 1–24. (in Russian). https://doi.org/10.20948/prepr-2020-110
- Ezhova N.A., Sokolinsky L.B. Survey of parallel computation models. Bulletin of the South Ural State University. Series: Computational Mathematics and Software Engineering, 2019, vol. 8, no. 3, pp. 58–91. (in Russian). https://doi.org/10.14529/cmse190304
- Spevak L.F., Nefedova O.A. Numerical solution to a two-dimensional nonlinear heat equation using radial basis functions. *Computer Research and Modeling*, 2022, vol. 14, no. 1, pp. 9–22. (in Rusian). https://doi.org/10.20537/2076-7633-2022-14-1-9-22
- Dul'nev G.N. Heat and Mass Transfer in Electronic Equipment. Moscow, Vysshaya Shkola Publ., 1984, 247 p. (in Russian)
- Kalitkin H.H. Numerical Methods. Moscow, Nauka Publ., 1978, 512 p. (in Russian)
- Al'shin A.B., Al'shina E.A., Boltnev A.A., Kacher O.A., Koryakin P.V. Numerical solution of initial-boundary value problems for Sobolev-type equations on quasi-uniform grids. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2004, vol. 44, no. 3, pp. 465–484.

Авторы

Шафир Роман Сергеевич — лаборант-исследователь, Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы, Москва, 117198, Российская Федерация, https://orcid.org/0009-0000-0877-7533, romanshafir@mail.ru

Давыдова Марина Александровна — кандидат физико-математических наук, доцент, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, 119991, Российская Федерация, sc 7006472962, https://orcid.org/0000-0002-9255-7353, m.davydova@ physics.msu.ru

Корпусов Максим Олегович — доктор физико-математических наук, доцент, профессор, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, 119991, Российская Федерация; ведущий научный сотрудник, Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы, Москва, 117198, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0002-5336-4559, korpusov@gmail.com

Перлов Анатолий Юрьевич — кандидат технических наук, доцент, Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», Москва, 124498, Российская Федерация, sc 57215321304, https://orcid.org/0000-0001-8480-3772, laperlov@ yandex.ru

Тимошенко Александр Васильевич — доктор технических наук, профессор, начальник комплексного отдела, АО «Радиотехнический институт имени А.Л. Минца», Москва, 127083, Российская Федерация, вс 57217674240, https://orcid.org/0000-0002-9791-142X, u567ku78@gmail.com

Статья поступила в редакцию 12.07.2023 Одобрена после рецензирования 28.10.2023 Принята к печати 17.11.2023



Authors

Roman S. Shafir — Research laboratory assistant, Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba, Moscow, 117198, Russian Federation, https://orcid.org/0009-0000-0877-7533, romanshafir@mail.ru

Marina A. Davydova — PhD (Physics & Mathematics), Associate Professor, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991, Russian Federation, SC 7006472962, https://orcid.org/0000-0002-9255-7353, m.davydova@physics.msu.ru

Maxim O. Korpusov — D.Sc. (Physics & Mathematics), Associate Professor, Professor, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991, Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba, Moscow, 117198, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0002-5336-4559, korpusov@gmail.com

Anatoly Yu. Perlov — PhD, Associate Professor, NIU MIET, Moscow, 124498, Russian Federation, sc 57215321304, https://orcid.org/0000-0001-8480-3772, laperlov@yandex.ru

Alexander V. Timoshenko — D.Sc, Professor, Head of Department, JSC "Academician A.L.Mints Radiotechnical Institute", Moscow, 127083, Russian Federation, Sc 57217674240, https://orcid.org/0000-0002-9791-142X, u567ku78@gmail.com

Received 12.07.2023 Approved after reviewing 28.10.2023 Accepted 17.11.2023

Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1223-1232

Convective heat transfer and hydrodynamics of flow at the endwall around a turbine blade under the influence of a magnetic field Kozhikkatil Sunil Arjun^{1⊠}, Porathoor Sunny Tide²

^{1,2} Division of Mechanical Engineering, School of Engineering, Cochin University of Science and Technology, Kochi, 682022, India

¹ arjunks@cusat.ac.in^{\box}, https://orcid.org/0000-0003-1832-3759

² tideps@cusat.ac.in, https://orcid.org/0000-0002-8061-113X

Abstract

The present study analyses the influence of magnetohydrodynamics on endwall heat transfer in turbine blades using computational fluid dynamics simulations. The simulations consider the three-dimensional geometry of the turbine blade, the magnetic intensity, and the boundary conditions. The outcome revealed the existence of a magnetic field can outstandingly increase the pitch-averaged film cooling effectiveness and endwall heat transfer, particularly near the edges of the turbine vane with an optimal magnetic field. This results in a more uniform distribution of heat transfer along the endwall and can help to reduce hot spots and prevent thermal damage to the blade. The research also highlights the importance of considering the magnetic intensity and its impact on the flow characteristics and heat transfer when designing turbine blades for high-speed applications. By optimizing the design of the turbine blades to take into account the magnetohydrodynamic effect, engineers can improve the overall performance and lifespan of these critical components. Numerical simulations had been utilized to forecast the impacts of contouring of endwalls efficiently, employing the secondary kinetic energy coefficient as the accomplished parameter demonstrated in the current investigation. A reduction in endwall heat load with enhanced net heat flux reduction and aerodynamic performance is reported for a non-axisymmetrically contoured endwall subjected to optimal magnetic field strength. The novelty of the present study is the establishment of the impact of vortices on endwall heat transfer with respect to the vane under the influence of magnetohydrodynamics to reduce the weight and cost of a turbine engine.

Keywords

non-axisymmetric contouring, magnetohydrodynamics, net heat flux reduction, aerodynamic performance, secondary kinetic energy

For citation: Arjun K.S., Tide P.S. Convective heat transfer and hydrodynamics of flow at the endwall around a turbine blade under the influence of a magnetic field. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1223–1232. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1223-1232

УДК 532.51

Конвективный теплообмен и гидродинамика течения у торцевой стенки лопатки турбины под действием магнитного поля

Кожиккатил Сунил Арджун¹, Поратур Санни Тайд²

^{1,2} Отделение машиностроения, инженерная школа, Кочинский университет науки и технологий, Кочи, 682022, Индия

¹ arjunks@cusat.ac.in^{\boxdots}, https://orcid.org/0000-0003-1832-3759

² tideps@cusat.ac.in, https://orcid.org/0000-0002-8061-113X

Аннотация

Выполнен анализ влияния магнитогидродинамики на теплообмен на торцевых стенках лопаток турбины с использованием компьютерного моделирования. При моделировании учтена трехмерная геометрия лопатки турбины, напряженность магнитного поля и граничные условия. Результат моделирования показал, что существование магнитного поля может значительно повысить эффективность пленочного охлаждения в среднем на шаг и теплообмен на торцевой стенке, особенно вблизи краев лопатки турбины с оптимальным магнитным полем. Это приводит к более равномерному распределению теплопередачи вдоль торцевой стенки

© Arjun K.S., Tide P.S., 2023

и может помочь уменьшить количество горячих точек и предотвратить термическое повреждение края лопатки турбины. Исследование показало необходимость учета напряженности магнитного поля и его влияние на характеристики потока и теплопередачу при проектировании лопаток турбин для высокоскоростных применений. Оптимизируя конструкцию лопаток турбины с учетом магнитогидродинамического эффекта, инженеры могут улучшить общую производительность и срок службы этих критически важных компонентов. Численное моделирование применено для эффективного прогнозирования последствий контурирования торцевых стенок с использованием коэффициента вторичной кинетической энергии в качестве окончательного параметра, полученного в результате выполненного анализа. Показано снижение тепловой нагрузки на торцевую стенку лопасти турбины с уменьшением чистого теплового потока и улучшение аэродинамических характеристик торцевой стенки с неосесимметричным контуром, подвергнутой воздействию магнитного поля оптимальной напряженности. В работе продемонстрировано влияние вихрей на теплообмен торца относительно лопатки под воздействием магнитогидродинамики для снижения массы и стоимости газотурбинного двигателя.

Ключевые слова

неосесимметричное контурирование, магнитогидродинамика, уменьшение чистого теплового потока, аэродинамические характеристики, вторичная кинетическая энергия

Ссылка для цитирования: Арджун К.С., Тайд П.С. Конвективный теплообмен и гидродинамика течения у торцевой стенки лопатки турбины под действием магнитного поля // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1223–1232 (на англ. яз.). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1223-1232

Introduction

Heat transfer in magnetohydrodynamic (MHD) endwall contouring in turbine blades is a significant and novel research area with several potential applications in the field of power generation. Endwall contouring of the turbine is a method used in gas turbines to control the flow of air and improve turbine efficiency [1]. By applying a magnetic field to the fluid, the fluid is forced to move in a particular direction, which can be used to control the flow [2]. The effects of the magnetic field applied transversely to the direction of the steady turbulent flow could observe the flow field control and heat transfer when numerically studied [3]. The magnetic intensity required for the flow control can be quite low, and the magnetic field can interfere with the operation of other heat transfer components in the flow [4]. Additionally, the design and implementation of an MHD system can be complex and expensive [5]. Nonaxisymmetric endwalls are getting universal status owing to their accomplished competencies, changing the characteristics of the secondary flow and altering the film cooling potential with respect to endwalls.

The convective heat transfer and hydrodynamics of flow under the effect of low magnetic field strength can affect the boundary layer development, flow separation, and turbulence intensity, which in turn can modify the average Nusselt number (Nu) increase of more than 10 % by Hartmann number (Ha) of 12 [6]. The Lorentz forces induced by the magnetic field can also modify the flow patterns and velocity profiles, leading to changes in the rotating disk pressure distribution and drag coefficient [7]. The extent of these modifications depends on the impacts of the strength and orientation of the magnetic field, the fluid properties, and the geometry on the thermal exchange of nanofluid flow over a plate [8]. The impact of slip as well as MHD of a layer of flow boundary on the thermal exchange across a plate in motion is investigated using the generation of distinct entropy by numerical simulations [9]. The effects of MHD on the nanofluid flow and heat transfer in a stretchable surface are analyzed using Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations [10] and found to significantly reduce the separation bubble size and enhance its impact on heat transfer.

The use of MHD for thermal exchange augmentation over a two-way, proliferating, stretching sheet of a permeable nature, using a channel flow with a magnetic field applied parallel to the flow direction was investigated [11]. Aerothermal revamping of film cooling hole regions at the squealer tip of a high-pressure turbine vane using CFD simulations is optimized for cooling effectiveness and aerodynamic performance [12]. The influence of MHD on the heat transfer of a curved blade with turbulators in a 3D duct using numerical simulations is examined [13]. The external magnetic field exerting towards the gradient of temperature has an outstanding effect on thermal exchange and hence should be taken into account when designing for high-speed applications with a channel flow [14]. A rectangular duct with a magnetic field applied perpendicular to the flow direction was investigated [15] and found that the MHD system improved the fluid mixing and reduced the separation bubble size, leading to a maximum heat transfer enhancement. The Nu diminishes as the *Ha* rises beyond a critical value [16] in a swirling flow due to a rotating disk of a cylindrical enclosure. A detailed turbine flow modeling at low and high turbulence intensities is performed concerning the heat transfer and hydrodynamics in 3D throughout the optimization by numerical simulations and the impacts of the different secondary flow structures on the endwall thermal exchange are described in depth [17].

The secondary kinetic energy coefficient (C_{ske}) was distinctly observed to be the best factor for the study objective. An acuminate elevation in C_{ske} (150 % at incidence 5°) at the vane row downstream with 50 % of the axial chord plane was distinguished [18]. Delineated the rotor allied angle of exit flow angle, coefficient of loss, as well as the C_{ske} as the best productive criteria for designating the impacts of the shape deviations of the endwall contouring as well as efficiency, while other parameters indicated the load variation [19]. The helicity parameter cannot be optimized in comparison with C_{ske} , a drawback established [20] and suggests that concerning the turbine, the helicity parameter is not suitable [19]. Nonaxisymmetric contouring of the endwall can outstandingly increase the productive extent of the purge flow area by up to 28.29 %, and the endwall adjacent to the suction surface can attain greater cooling potential [21]. The establishment tendencies of succeedinggeneration turbine vane cooling mechanisms, in excess of 2000 K temperature, include the progressive revealing of enhanced efficiency complex cooling arrangement as well as manifold objective collective cooling composition [22].

Some of the key research gaps include a lack of experimental validation, limited understanding of the interaction between MHD and other turbine components (blade and cooling system), optimization of MHD parameters, assessment of long-term durability and maintenance requirements, and investigation of potential safety concerns. Further research is needed to optimize the magnetic intensity, the direction of the magnetic field as well as endwall composition to determine the most effective configurations for MHD in turbine endwall contouring. Further incrementing models concerning 3D printing, complex cooling composition models, and incrementing in response with the artificial intelligence algorithm is also of importance. Monitoring the cooling performance of fresh cooling media as well as heat pipes, consolidated heat conservation with fresh heat insulators, and the execution of diminished resistance and elevated productive dimpled surface cooling are also pivotal. The non-axisymmetrically contoured endwall heat load reduction with better net heat flux reduction and aerodynamic performance at an optimal magnetic field strength is the innovativeness of this investigation.

The span of MFR so far reported is inadequate for the beneficial accomplishment of cooling the passage concerning the Nozzle Guide Vane (NGV). The endwall pressure surface substantiates that the coolant amenability to accomplish the zone is extremely crucial. Furthermore, the cavity of fishmouth in the passage of NGV-combustor creates a cavity vortical structure of 3D nature that carries away the coolant towards the pitch route. A higher step height due to combustor-NGV misalignment necessitates elevated momentum of coolant to control the vortices generated through various steps. The vortices prevent the upstream coolant from reaching the NGV passage. In addition, the movement sequence of the coolant is contingent on its blow rate. Diminishing the density ratio or enhancing the Blowing Ratio (BR) leads to elevated momentum of coolant, and can help the jets of coolant smother the Horseshoe Vortex (HV) additionally, but also cause more lift-off, mitigating the coolant reattachment which adversely affects the cooling performance. This study is aimed to brighten the knowledge on gas turbine cooling at regions on the endwall that have the greatest outstanding influence on the aerodynamic or endwall thermal exchange accomplishments. In the current investigation, collaboration is established connecting mainstream as well as purge flow upon non-axisymmetric contouring of endwall. The novelty of the present study is the establishment of the impact of a 3D vortical structure on turbine endwall heat transfer to reduce the weight and cost of a turbine engine. The present study reduces the endwall

heat load of the vane and improves the overall efficiency of the turbine. The present study forms the first report on the impact of MHD on endwall heat transfer in respect of turbine vane.

Research methodology

The simulations are typically conducted using a threedimensional model (Fig. 1) of the turbine blade with MHD effects taken into account using CFD software on endwall heat transfer in turbine blades. The simulations consider the geometry of the turbine blade, the boundary conditions, and magnetic intensity, and the results are typically analyzed using the Nu. The magnetic field is applied around the blade in the direction of the rotation of the blade. Though predictions using Shear Stress Transport (SST) Transition models were a high replica of experimental values concerning secondary flow regions and heat transfer, the suction side trailing edge turbulence transition could not be evidenced. High-fidelity secondary flow simulations of the vane cascade passage are rare due to the high cost and lack of experimental data. A shape function and cooling hole positions were optimized from an efficient turbine endwall cooling by multi-fidelity simulations. The size and strength of the vortex and hence the endwall heat transfer were over-predicted by the Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) models and hence periodic corrections and improvements are inevitable. The $Re_{\theta-\gamma}$ model can utilize only the local information and correlations of experimental data that cause the transition.

The $Re_{\theta-\gamma}$ transition model accurately predicts boundary layers of bound and leniently parted in the zone of transition, while its correctness lowers for densely parted flows. To enhance the forecast of the accomplishment at the design scale, at which laminar as well as turbulent flow zones frequently exist concurrently on the vanes, two models viz., the SST eddy-viscosity turbulence model which takes care completely the transition of flow, and the $Re_{\theta-\gamma}$ transition model which solves for predicting flow transition are used together. The fresh turbulence closure integrates the advantages of both models exercising an approach of additive hybrid filtering. This combination model has several relatively minor variations in the eddy-viscosity definition that employs the rate of strain alternately with the vorticity magnitude. This procedure has the prospective for correctly securing densely parted layers of boundary in the transitional span of *Re* at a judicious calculation expense. The transitional hybrid approach secures the physics analogous with a parted wake over a span of Re 10 to $2 \cdot 10^6$ and is superiorly recommended in securing accomplishment and flowfield characteristics of engineering attraction than persisting turbulence models. It leads to a reduction of the numerical uncertainty (discretization errors) and the sharpest transition.

A linear vane cascade is simulated by Ansys Fluent¹ with the RANS model combining SST eddy viscosity [23] with the $Re_{\theta-\gamma}$ model [24] for the flow field around the

¹ Fluent FLUENT User's Guide, New Hampshire, USA, FLUENT Inc., 2003. Available at: https://www.archive.org/details/ ANSYSFluentUsersGuide (accessed: 15.11.2023).



Fig. 1. Schematic diagram of the linear vane cascade

blade with non-axisymmetric contouring of the endwall, thermal exchange, and magnetic field. Two different endwall shapes viz. flat and contoured (axisymmetric convergent) designed for the first NGV were investigated in this study. The computational domain has 16 % inlet turbulence, $1.7 \cdot 10^6$ outlet *Re*, and 0.85 outlet Mach number. The upstream purge flow is considered by the 42 cylindrical cooling double-row holes with a diameter of 2.4 mm which are located at 0.4 *C*_{ax} upstream of the center passage vane leading edge.

The mesh size of the CFD model (Fig. 2) used in endwall contouring and magnetic field studies of turbine blades depends on several factors, such as the vane geometry, the flow conditions, the turbulence model used, and the accuracy required in the simulation. A nested grid is used for the vane surface proximity grid refining and on the pressure surface as well as the boundary layer of streamwise trajectory. Meshes of a structured nature were created through Integrated Computer-aided Engineering and Manufacturing (ICEM) CFD with low Re meshes with nodes of 6.10⁶ for the axisymmetric convergent contoured endwall vane passage, and $9 \cdot 10^6$ for the coolant holes as well as the plenum. For the locations of the boundary layer of the wall, meshes were concentrated using a height of $1.5 \cdot 10^{-3}$ mm for the first cell and a 1.15 expansion factor to reproduce the flow evolution. The y+ value was maintained lower than 0.8 on the endwall. Film cooling effectiveness (FCE) spread around the vane leading edge on the contoured endwall with $6 \cdot 10^6$, $9 \cdot 10^6$, $12 \cdot 10^6$, and $15 \cdot 10^6$ grid points were compared at 2.5 % BR. The FCE value of 0.48 was unchanged when the grid number increased from



Fig. 2. Mesh details of the contoured vane endwall

12.10⁶ to 15.10⁶. The mesh size was fine enough to resolve the layer of boundary adjacent to the blade surface and the turbulence structures in the flow field and consistent throughout the domain. Grid-independent endwall film cooling effectiveness was evident with a 12.10⁶ mesh size. The Root Mean Square (RMS) error in the predictions is 9 %. Convergence is checked with the RMS below 10⁻⁶ upon termination after 2400 iterations.

Conditions of adiabatic and no-slip wall boundary had been assigned with respect to the holes as well as the plenum of coolant. The coolant temperatures were set as 298 and 295 K. The near endwall film flow temperatures are equal to the adiabatic wall temperatures. A uniform wall temperature of 300 K was applied. Periodic boundary conditions were assigned over the computational domain boundary towards the pitch-ward direction to simulate periodic flow or temperature fields in the computational domain. A thin Blasius boundary layer is imposed at the inlet with $Re_r = 2 \cdot 10^5$. Consistent Neumann boundary conditions to the velocity, temperature, and pressure fields, and No-slip boundary conditions to the vane and endwalls are imposed. Uniform heat flux to the vane, endwall heating condition of the leading edge, and an adiabatic condition at its upstream are provided. Pressure-velocity coupling using a pressure-based method was used.

Film cooling introduces a cooler secondary fluid onto the external surface of a component to shield it from hightemperature gases by creating a thin protective layer that reduces heat transfer and prevents direct contact with hot gases. The coolant mixes with the boundary layer without significantly increasing turbulence or entraining additional hot freestream gas. The *Nu* and the effectiveness of adiabatic film cooling (η) with respect to the endwall are found utilizing the following equations:

$$Nu = \frac{h_c C}{k},$$
$$\eta = \frac{T_{aw,c1} - T_{aw,c2}}{T_{c1} - T_{c2}}.$$

Here, h_c is the Heat Transfer Coefficient (HTC), *C* is the NGV chord length and *k* is the thermal conductivity. The adiabatic wall temperatures, $T_{aw,c1}$, and $T_{aw,c2}$ are at the first (T_{c1}) and second (T_{c2}) coolant temperatures.

The heat transfer coefficient is defined as the coefficient of proportion, connecting the heat flux as well as the thermodynamic operating force for the heat flow.

$$h = q/\Delta T$$
,

where q represents the heat flux or thermal power in an area of unity and ΔT is the temperature deviation connecting the surface of the solid and the adjacent area of fluid.

Reynolds number (Re) is defined as the fraction of forces of inertia to viscosity inside the fluid, which is amenable to comparative inner motion owing to various velocities of fluid.

$$Re = \rho u L/\mu$$
,

where ρ represents the fluid density, *u* denotes the speed of the flow, *L* represents the specific length, and μ denotes the fluid dynamic viscosity.

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

The Hartmann number (Ha) is the ratio of electromagnetic force to the viscous force.

$$Ha = BL \sqrt{\frac{\sigma}{\mu}},$$

where *B* denotes the intensity of the magnetic field, *L* represents the specific length, σ denotes the electrical conductivity, and μ represents the fluid dynamic viscosity.

The Net Heat Flux Reduction (NHFR) denotes an absolute appraisal of the endwall thermal load and is estimated using the FCE and HTC (h) as follows:

$$NHFR = 1 - h/h_0(1 - \eta\varphi),$$

$$\varphi = T_{\infty} - T_c/T_{\infty} - T_w,$$

where h_0 denotes heat transfer coefficient without film cooling, φ represents the effectiveness of cooling on an overall basis denoted by non-dimensional metal temperature, T_{∞} is the freestream temperature, T_c is the coolant temperature and T_w is the wall temperature. For a turbine vane with film cooling, its value is set as 1.6 [25].

The Total Pressure Loss Coefficient (TPLC) is a measure of aerodynamic performance and is calculated as the fraction of the total pressure drop by the variation in static and incoming pressure. TPLC with coolant blowing are:

$$TPLC = \frac{\frac{\dot{m}_{c}}{\dot{m}_{c} + \dot{m}_{m}} P_{t,cin} + \frac{\dot{m}_{c}}{\dot{m} + \dot{m}_{m}} P_{t,m} - P_{t,f}}{P_{t,m} - P_{f}}$$

Coolant mass flow rate is denoted \dot{m}_c , mainstream mass flow rate \dot{m}_m , coolant inlet total pressure $P_{t,cin}$, mainstream total pressure $P_{t,m}$, mixed flow total pressure $P_{t,f}$ and mixed flow static pressure P_f . No slot leakage is seen with a zero value of \dot{m}_c .

The C_{ske} is formulated [26] as:

$$C_{ske} = \frac{V_{sec}^2 + V_r^2}{V_{in}^2},$$

where:

$$V_{sec} = V \sin(\alpha - \alpha_{mid})$$

V represents absolute velocity concerning secondary, relative reference, and inlet. α_{mid} is substituted with the angle of flow at the exit denoted as α by its scalar mean.

A comparison with the experiment measurements [27] provided a good agreement at a Mass Flux Ratio (MFR) of 2.5 along the middle pitch for axisymmetric convergent contoured endwall Nu distributions (Fig. 3). An enhanced thermal exchange is not well forecasted owing to the impact of the HV leg concerning the suction surface. A deterministic unsteadiness might also contribute to the measured turbulent kinetic energy since the HV has a bimodal nature. This concentrated turbulent kinetic energy might have resulted in the gradients of heat transfer. The numerical predictions in general show a good agreement with measurements in trend, the magnitude has differences concerning upstream locations of the vane leading edge



Fig. 3. Validation of *Nu* at MFR 2.5 along the middle pitch for contoured endwall

(x < 0). The maximum prediction error is less than 19 % in the whole vane passage $(0 < x/C_{ax} < 0.65 C_{ax})$ and less than 1.24 % downstream of the vane passage throat $(x > 0.65 C_{ax})$. This prediction error might be caused by the surface roughness in the original measurements, (but treated as a smooth one in simulations) as well as the insufficient prediction of endwall secondary flows. In general, the present numerical method is reliable. It can be used to investigate the impacts of axisymmetric convergent contouring and BR on film cooling as well as the associated phantom cooling distributions on the endwall, turbine stage efficiency, heat transfer, and aerodynamic performances of the vane pressure side. Several authors reported the existence of maximum prediction error in a contoured endwall to the tune of 20 % and an extreme deviation, especially in locations having elevated skew (greater than 70 degrees) as well as adverse gradients of pressure downstream of HV separation and reattaching flow due to adequately capturing the physics of complex flow [27].

Results and discussion

The secondary flow patterns can be further modified due to the interaction between the magnetic field and the electrically conductive fluid in the blade. By increasing the heat transfer, the MHD effect can help to reduce the temperature of the blade, leading to the thermal stress lowering and extending the lifespan of the blade. The increased heat transfer can be used to improve the cooling effectiveness of the blade, which can help to prevent thermal damage and improve the overall performance.

Impact of magnetohydrodynamics on Pitchaveraged endwall film cooling effectiveness

To quantify the film cooling benefit for the entire endwall surface, pitch-averaged endwall film cooling effectiveness, $\overline{\eta}$ for non-axisymmetrically contoured endwall at MFR 1.5 % is depicted in Fig. 4. The endwall η rapidly increases (1.2 to 2.3 %) as *Ha* increases from 25 to 75, because the HV is suppressed by the high momentum coolant. As the *Ha* increases from 75 to 100, a reduction in endwall $\overline{\eta}$ is observed (almost equal to or lower than that

for Ha 25). The non-axisymmetric convergent contouring is beneficial for the endwall $\overline{\eta}$, but the level of benefit is significantly affected by the Ha. The level of benefit first increases then decreases with the increasing Ha, and the maximum increase (2.3 %) is noticed around the vane leading edge at Ha 75. Elevation of the endwall-specific thermal load because of the coolant jet merging is evident in contoured geometry with the MFR 0.5 and 1.0 %. But the zone is migrated further downstream than in the flat endwall. An elevated flow rate of coolant markedly lowers the thermal load adjacent to the upstream location and the leading edge for the contoured endwall with an MFR of 1.5 %. At elevated MFR, superior cooling is achieved adjacent to the region of stagnation of the leading edge. The coolant spread in the direction of the mainstream is not elevated much for MFR 1.5 % in comparison with 1.0 % because of the coolant lift-off from the endwall. The Nu contours for MFR 1.5 % with extremely elevated zones of heat transfer corroborate this behavior and might be because of higher turbulence amalgamation of coolant and mainstream. In the case of the contoured endwall, the spread of coolant film is much more elevated over the airfoil suction side in the streamwise direction than the flat endwall for elevated coolant MFR. This phenomenon might be because of the adherence of the coolant with the endwall by the impact of contouring at the passage downstream with not much influence of the secondary flow. At 1.5 % MFR, the flat endwall has slightly elevated effectiveness at the leading-edge forepart. But the contoured endwall has markedly elevated effectiveness at the leading-edge forepart at 0.5 and 1.0 % MFR.

Impact of magnetohydrodynamics on thermal exchange

As the *Ha* magnetic fields are elevated in the range of 25–75, a significant diminishing impact on endwall *Nu* in turbine blades is noticed to the tune of 1.3 % to 2.3 % (Fig. 5). The magnetic field acts to suppress the turbulence in the flow near the endwall leading to a more laminar flow regime and diminished *Nu*. However, high Hartmann number magnetic fields can also lead to increased pressure drop and flow resistance, which can reduce the gross

productivity of the turbine blade. When Ha is enhanced to 100, the reduction in Nu is lowered to 1.2 % (lower than that at Ha 25). Therefore, Ha 75 has an optimal magnetic field strength that diminishes the Nu while minimizing the associated losses. Increasing the Hartmann number from 0 to 75 resulted in an approximately 2.3-fold decrease in the Nu on the endwall of a turbine blade. As the Hartmann number increases, the magnetic field becomes stronger and can suppress turbulence in the flow leading to a more laminar flow regime. Increasing the Hartmann number to 25 can result in the formation of multiple vortex structures including Dean vortices and counter-rotating streamwise vortices. These vortex structures can enhance heat transfer near the endwall by promoting the mixing of the fluid and increasing the convective HTC. The augmentation in thermal exchange near the vane edges results in a more uniform distribution of heat transfer along the endwall, which can help to reduce hot spots and prevent thermal damage to the blade being beneficial for improving the overall performance of turbine blades.

Impact of magnetohydrodynamics on net heat flux reduction

A non-axisymmetrically contoured endwall significantly augments the NHFR when the MFR is greater than 1.0 % leading to a diminished heat load on the endwall than a flat one. An elevated NHFR explains a lower heat load on the endwall. The NHFR has the main gain from the lowering of heat transfer than the augmentation in film cooling at MFR 0.5 % and hence the NHFR enhancement is not very beneficial. At MFR 1.0 %, an endwall with a non-axisymmetrically contoured geometry considerably enhances the NHFR at an axial coordinate/axial chord length, $x/C_{ax} < 0.65$ with a still elevated value upstream. A 1.5 % contouring amplitude achieves the highest NHFR throughout the endwall and might be due to augmenting the FCE and lowering the rates of heat transfer. At $x/C_{ax} < 0.65$ with MFR 1.5 %, the NHFR gets augmented continuously for a non-axisymmetrically contoured endwall. The peak NHFR is accomplished at almost all endwall locations with a 1.0 % amplitude of contouring. The NHFR at the endwall front gets lowered with the escalation of the amplitude of contouring.



Fig. 4. Impact of magnetic flux on Pitch-averaged endwall film cooling effectiveness at MFR = 1.5 %



Fig. 5. Impact of magnetic flux on Nu at MFR = 1.5 %

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

Adiabatic cooling effectiveness is more on endwall with contoured geometry than that with flat geometry at similar MFR. Since the contoured endwall has a wide area for cooling, the enhanced cooling performance benefit in the passage vanishes. However, the impact of effectiveness enhancement in adiabatic cooling is higher, compared to the area change, leading to a lower endwall net heat flux in comparison to that in the passage, when MFR > 1.625 %. The marked augmentation in NHFR (Table) at the endwall of non-axisymmetrically contoured geometry with the introduction of magnetic flux from Ha 25 to 75 at MFR 1.5 % is the outcome of diminishing the strength of the vortex in the passage by beneficially dominating the secondary flow as well as by lowering the cross-passage flow gradients and the competency of the coolant film in penetrating far up to the trailing edge. The drop in local HTC at augmented pressure side NHFR recorded a range of 1.6% to 2.63 % at Ha 25 to 75 and a further drop to 1.05 % at Ha 100. The current study thus established the optimal magnetic intensity as Ha 75. The effect of the dissemination of coolant film is thus dominating towards the platform suction surface as well as towards the slot stagnation region downstream. An enhanced overall Nu is found at MFR 0.5–1.0 % with the non-axisymmetrically contoured endwall, marked augmentation in NHFR can be acquired since the FCE is elevated than the flat endwall. At 1.5 % MFR, the performance of a contoured geometry is higher as coolant film adheres with the surface by contouring, and for flat geometry, jet lift-off takes place. A contoured geometry considerably augments the endwall NHFR airfoil (averaged crosswise at the direction of length) at MFR >1.0 %. Hence, a contoured geometry can lower the endwall heat load than a flat geometry.

Impact of magnetohydrodynamics on aerodynamic performance

Fig. 6 shows TPLC derived with the mean mass flow at MFR 1.5 % and x/C_{ax} 1.25 in the passage of nonaxisymmetrically contoured endwalls subjected to magnetic fields. The contoured endwall passage revealed elevated aerodynamic performance with lower TPLC values at the MFR of 1.5 % upon the introduction of magnetic flux. The TPLC derived with the mean mass flow of passage showed an identical tendency with magnetic flux. As Ha rises, TPLC lowers first, becomes stand still for a while, and rises for an elevated Ha of 100. At MFR 1.5 % for contoured endwall, passage possesses inferior aerodynamic losses from Ha 25 (1.24 %) to 75 (2.23 %) compared to elevated Ha, with hot gas ingression. Hence, Ha 75 is the optimal magnetic field strength noticed in this study. The lower TPLC derived with the mean mass flow is because of the weakening of vortices at the leading edge upstream by coolant injection. When MFRs as well as momentum fluxes of coolant injection are elevated, new vortices



Fig. 6. Impact of magnetic flux on TPLC at $x/C_{ax} = 1.25$, MFR = 1.5 %

develop in the upstream location and aerodynamic losses are elevated.

Secondary kinetic energy coefficient at exit

The loss coefficient is an assessment of the depletion of aggregate energy at the turbine downstream flow exit, while C_{ske} represents unavailable kinetic energy at the flow exit. Therefore, C_{ske} is a component measure of the kinetic energy of flow and assesses the anticipated losses due to secondary flow at a specific position and never a replacement for loss. The experimental results concerning flat endwalls had elevated C_{ske} values at the tip position. The association between the calculated and simulated C_{ske} values is outstanding with the exclusion of the findings of the Baldwin-Lomax model [28], with no purpose to acquire perfect vorticity of the flow. The magnitude of divergence between the various shapes of endwalls is five-fold higher in the case of C_{ske} , in comparison to the diversification with respect to the loss coefficient and hence adjudged as the highly validated physical parameter in a flow field to estimate the prospective loss arising from the secondary flow [29].

The non-axisymmetric endwall shape developed for the turbine has strongly lowered exit secondary kinetic energy up to 36 % and 47.4 % for 15 % and 20 % span than the flat endwall. C_{ske} slowly reduces as the span increases from 2.5 % to 20 %. Thereafter it lowers rapidly with an optimal span of 30 % and the lowest after a 40 % span. C_{ske} is elevated alone consequent to the inception of endwall contouring at lower thermal load and originates from the enhanced vigor of the system of the HV. CFD, therefore, can be utilized to forecast the effects of contouring of endwall, amenable with C_{ske} as the significant parameter demonstrated in the current investigation.

Table. Impact of magnetic flux on NHFR at MFR = 1.5 %

x/C_{ax}	Ha = 0	<i>Ha</i> = 25	Ha = 50	<i>Ha</i> = 75	Ha = 100
0	1.90	1.9300	1.9400	1.950	1.9200
0.65	0.04	0.0406	0.0408	0.041	0.0405
1	0	0	0	0	0

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6



Fig. 7. Comparison between contoured and flat vane endwall at the exit for secondary kinetic energy coefficient

Conclusion

With the magnetohydrodynamic effect, a more uniform distribution of heat transfer performance is achieved, reduced hot spots and thermal damage, and improved the critical component overall efficiency and lifespan. Nonaxisymmetric endwall contouring leads to improved net heat flux reduction and aerodynamic performance. It has the potential to reduce the separation bubble size on the endwall of the turbine blade and can lead to the lowering of turbulence and secondary flow, which in turn could

References

- Arjun K.S., Tide P.S., Biju N. Optimum profiles of endwall contouring for enhanced net heat flux reduction and aerodynamic performance. *Journal of Harbin Institute of Technology (New Series)*, 2023, in press. https://doi.org/10.11916/j.issn.1005-9113.2023037
- Krishna M.V., Ahamad N.A., Chamkha A.J. Numerical investigation on unsteady MHD convective rotating flow past an infinite vertical moving porous surface. *Ain Shams Engineering Journal*, 2021, vol. 12, no. 2, pp. 2099–2109. https://doi.org/10.1016/j. asej.2020.10.013
- Xenos M., Dimas S., Kafoussias N. MHD compressible turbulent boundary-layer flow with adverse pressure gradient. *Acta Mechanica*, 2005, vol. 177, pp. 171–190. https://doi.org/10.1007/s00707-005-0221-7
- Jaafar A., Waini I., Jamaludin A., Nazar R., Pop I. MHD flow and heat transfer of a hybrid nanofluid past a nonlinear surface stretching/ shrinking with effects of thermal radiation and suction. *Chinese Journal of Physics*, 2022, vol. 79, pp. 13–27. https://doi.org/10.1016/j. cjph.2022.06.026
- Ali A., Kanwal T., Awais M., Shah Z., Kumam P., Thounthong P. Impact of thermal radiation and non-uniform heat flux on MHD hybrid nanofluid along a stretching cylinder. *Scientific Reports*, 2021, vol. 11, pp. 20262. https://doi.org/10.1038/s41598-021-99800-0
- Mobadersani F., Rezavand A. MHD effect on nanofluid flow and heat transfer in backward-facing step using two-phase model. *AUT Journal* of Mechanical Engineering, 2020, vol. 4, no. 1, pp. 51–66. https://doi. org/10.22060/AJME.2019.14843.5747
- Loganayagi V., Kameswaran P.K. Magnetohydrodynamic and heat transfer impacts on ferrofluid over a rotating disk: An application to hard disk drives. *Journal of Thermal Science and Engineering Applications*, 2021, vol. 13, no. 1, pp. 011001. https://doi. org/10.1115/1.4047007
- Nourbakhsh A., Mombeni H., Bayareh M. Effects of radiation and magnetohydrodynamics on heat transfer of nanofluid flow over a

augment the turbine efficiency. The level of maximum enhancement benefit of pitch averaged film cooling effectiveness (2.3 %) is noticed around the vane leading edge at Ha 75. Increasing the Ha from 0 to 75 resulted in an approximately 2.3-fold decrease in the Nu on the endwall of a turbine blade as well as enhanced net heat flux reduction (2.63 %) and aerodynamic performance (2.23 %). The optimum magnetic field strength identified for ideal turbine efficiency is Ha 75. The coefficient of secondary kinetic energy is demonstrated to be a significant criterion for the contouring of the turbine blade endwall. The paramount advantage of 47.4 % is accomplished for the endwall at a span of 20 % in respect of a non-axisymmetric contoured case in comparison to a flat case.

One of the main challenges is the requirement for a strong magnetic field, which can be difficult and expensive to generate. Additionally, the magnetic field can interfere with the operation of other components in the turbine, which can further complicate the design and implementation of the magnetohydrodynamic system. The passage aft location, entrance boundary layer segregation downstream, the flow field around the upstream cavity in the HV development, and the location of the vortices with respect to the secondary flow away from the endwall need to be explored in designing endwall contours. Revamping the heat transfer forecast of the endwall seems to be the upcoming prime obstacle in enhancing durability and axial turbine efficiency by way of ideal thermal and aerodynamic designs. It may be possible to develop more effective and efficient magnetohydrodynamic systems for turbine endwall contouring.

Литература

- Arjun K.S., Tide P.S., Biju N. Optimum profiles of endwall contouring for enhanced net heat flux reduction and aerodynamic performance // Journal of Harbin Institute of Technology (New Series). 2023. in press. https://doi.org/10.11916/j.issn.1005-9113.2023037
- Krishna M.V., Ahamad N.A., Chamkha A.J. Numerical investigation on unsteady MHD convective rotating flow past an infinite vertical moving porous surface // Ain Shams Engineering Journal. 2021. V. 12. N 2. P. 2099–2109. https://doi.org/10.1016/j.asej.2020.10.013
- Xenos M., Dimas S., Kafoussias N. MHD compressible turbulent boundary-layer flow with adverse pressure gradient // Acta Mechanica. 2005. V. 177. P. 171–190. https://doi.org/10.1007/s00707-005-0221-7
- Jaafar A., Waini I., Jamaludin A., Nazar R., Pop I. MHD flow and heat transfer of a hybrid nanofluid past a nonlinear surface stretching/ shrinking with effects of thermal radiation and suction // Chinese Journal of Physics. 2022. V. 79. P. 13–27. https://doi.org/10.1016/j. cjph.2022.06.026
- Ali A., Kanwal T., Awais M., Shah Z., Kumam P., Thounthong P. Impact of thermal radiation and non-uniform heat flux on MHD hybrid nanofluid along a stretching cylinder // Scientific Reports. 2021. V. 11. P. 20262. https://doi.org/10.1038/s41598-021-99800-0
- Mobadersani F., Rezavand A. MHD effect on nanofluid flow and heat transfer in backward-facing step using two-phase model // AUT Journal of Mechanical Engineering. 2020. V. 4. N 1. P. 51–66. https:// doi.org/10.22060/AJME.2019.14843.5747
- Loganayagi V., Kameswaran P.K. Magnetohydrodynamic and heat transfer impacts on ferrofluid over a rotating disk: An application to hard disk drives // Journal of Thermal Science and Engineering Applications. 2021. V. 13. N 1. P. 011001. https://doi. org/10.1115/1.4047007
- 8. Nourbakhsh A., Mombeni H., Bayareh M. Effects of radiation and magnetohydrodynamics on heat transfer of nanofluid flow over a

plate. SN Applied Sciences, 2019, vol. 1, pp. 1581. https://doi. org/10.1007/s42452-019-1634-6

- Ellahi R., Alamri S.Z., Basit A., Majeed A. Effects of MHD and slip on heat transfer boundary layer flow over a moving plate based on specific entropy generation. *Journal of Taibah University for Science*, 2018, vol. 12, no. 4, pp. 476–482. https://doi.org/10.1080/16583655 .2018.1483795
- Ullah H., Hayat T., Ahmad S., Alhodaly M.S., Momani S. Numerical simulation of MHD hybrid nanofluid flow by a stretchable surface. *Chinese Journal of Physics*, 2021, vol. 71, pp. 597–609. https://doi. org/10.1016/j.cjph.2021.03.017
- Jusoh R., Nazar R., Pop I. Magnetohydrodynamic boundary layer flow and heat transfer of nanofluids past a bidirectional exponential permeable stretching/shrinking sheet with viscous dissipation effect. *ASME Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, vol. 141, no. 1, pp. 012406. https://doi.org/10.1115/1.4041800
- Yıldız F., Alpman E., Kavurmacioglu L., Camci C. An Artificial Neural Network (ANN) based aerothermal optimization of film cooling hole locations on the squealer tip of an HP turbine blade: preprint. SSRN Electronic Journal, 2022. https://doi.org/10.2139/ ssrn.4117325
- Alam T., Kim M-H. A comprehensive review on single phase heat transfer enhancement techniques in heat exchanger applications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2018, vol. 81, pp. 813– 839. https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.08.060
- Malvandi A. Film boiling of magnetic nanofluids (MNFs) over a vertical plate in presence of a uniform variable-directional magnetic field. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2016, vol. 406, pp. 95–102. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.01.008
- Inverse Heat Conduction and Heat Exchangers. ed. by S. Bhattacharyya, R. Mehta, M.M. Ardekani, R. Biswas. London, UK, IntechOpen Ltd., 2020. http://dx.doi.org./10.5772/intechopen.80096
- Mahfoud B. Simulation of magnetic field effect on heat transfer enhancement of swirling nanofluid. *International Journal of Computational Materials Science and Engineering*, 2022, vol. 11, no. 4, pp. 2250007. https://doi.org/10.1142/S2047684122500075
- Arjun K.S., Tide P.S., Biju N. Turbine passage secondary flow dynamics and endwall heat transfer under different inflow turbulence. *Journal of Harbin Institute of Technology (New Series)*, 2023, in press. https://doi.org/10.11916/j.issn.1005-9113.2023042
- Tsujita H., Mizuki S., Yamamoto A. Numerical investigation of effects of incidence angle on aerodynamic performance of ultra-highly loaded turbine cascade. *Proc. of the ASME Turbo Expo 2006: Power for Land, Sea, and Air, Turbomachinery, Parts A and B. Vol. 6*, 2006, pp. 839–849. https://doi.org/10.1115/GT2006-90939
- Snedden G.C. The Application of Non-Axisymmetric Endwall Contouring in a 1½ Stage, Rotating Turbine: PhD thesis, Durham University, United Kingdom, 2011.
- Vázquez R., Fidalgo V.J. The effect of Reynolds and Mach number on end-wall profiling performance. *Proc. of the ASME Turbo Expo* 2010: Power for Land, Sea, and Air, Turbomachinery, Parts A, B, and C. Vol. 7, 2010, pp. 1357–1368. https://doi.org/10.1115/GT2010-22765
- Du K., Jia Y., Song H., Chen L., Zhang Q., Cui T., Liu C. Effect of slot jet flow on non-axisymmetric endwall cooling performance of high-load turbines. *Machines*, 2023, vol. 11, no. 2, pp. 134. https:// doi.org/10.3390/machines11020134
- Schäflein L., Janssen J., Brandies H., Jeschke P., Behre S. Influence of purge flow injection on the performance of an axial turbine with three-dimensional airfoils and non-axisymmetric endwall contouring. *Journal of Turbomachinery*, 2023, vol. 145, no. 6, pp. 061004. https:// doi.org/10.1115/1.4056238
- Menter F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. *AIAA — Journal*, 1994, vol. 32, no. 8, pp. 1598–1605. https://doi.org/10.2514/3.12149
- Menter F.R., Langtry R.B., Likki S.R., Suzen Y.B., Huang P.G., Völker S. A correlation-based transition model using local variables — Part I: Model formulation. *Journal of Turbomachinery*, 2006, vol. 128, no. 3, pp. 413–422. https://doi.org/10.1115/1.2184352
- Lynch S.P., Thole K.A. Heat transfer and film cooling on a contoured blade endwall with platform gap leakage. *Journal of Turbomachinery*, 2017, vol. 139, no. 5, pp. 051002. https://doi.org/10.1115/1.4035202
- 26. Ingram G. Endwall Profiling for the Reduction of Secondary Flow in Turbines. PhD thesis. Durham University, United Kingdom, 2003.
- 27. Bai B., Li Z., Li J., Mao S., Ng W.F. The effects of axisymmetric convergent contouring and blowing ratio on endwall film cooling and

plate // SN Applied Sciences. 2019. V. 1. P. 1581. https://doi. org/10.1007/s42452-019-1634-6

- Ellahi R., Alamri S.Z., Basit A., Majeed A. Effects of MHD and slip on heat transfer boundary layer flow over a moving plate based on specific entropy generation // Journal of Taibah University for Science. 2018. V. 12. N 4. P. 476–482. https://doi.org/10.1080/16583 655.2018.1483795
- Ullah H., Hayat T., Ahmad S., Alhodaly M.S., Momani S. Numerical simulation of MHD hybrid nanofluid flow by a stretchable surface // Chinese Journal of Physics. 2021. V. 71. P. 597–609. https://doi. org/10.1016/j.cjph.2021.03.017
- Jusoh R., Nazar R., Pop I. Magnetohydrodynamic boundary layer flow and heat transfer of nanofluids past a bidirectional exponential permeable stretching/shrinking sheet with viscous dissipation effect // ASME Journal of Heat and Mass Transfer. 2019. V. 141. N 1. P. 012406. https://doi.org/10.1115/1.4041800
- Yıldız F., Alpman E., Kavurmacioglu L., Camci C. An Artificial Neural Network (ANN) based aerothermal optimization of film cooling hole locations on the squealer tip of an HP turbine blade: preprint // SSRN Electronic Journal. 2022. https://doi.org/10.2139/ ssrn.4117325
- Alam T., Kim M-H. A comprehensive review on single phase heat transfer enhancement techniques in heat exchanger applications // Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2018. V. 81. P. 813–839. https://doi.org/10.1016/j.rser.2017.08.060
- Malvandi A. Film boiling of magnetic nanofluids (MNFs) over a vertical plate in presence of a uniform variable-directional magnetic field // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2016. V. 406. P. 95–102. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.01.008
- Inverse Heat Conduction and Heat Exchangers / ed. by S. Bhattacharyya, R. Mehta, M.M. Ardekani, R. Biswas. London, UK, IntechOpen Ltd., 2020. http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.80096
- Mahfoud B. Simulation of magnetic field effect on heat transfer enhancement of swirling nanofluid // International Journal of Computational Materials Science and Engineering. 2022. V. 11. N 4. P. 2250007. https://doi.org/10.1142/S2047684122500075
- Arjun K.S., Tide P.S., Biju N. Turbine passage secondary flow dynamics and endwall heat transfer under different inflow turbulence // Journal of Harbin Institute of Technology (New Series). 2023. in press. https://doi.org/10.11916/j.issn.1005-9113.2023042
- Tsujita H., Mizuki S., Yamamoto A. Numerical investigation of effects of incidence angle on aerodynamic performance of ultra-highly loaded turbine cascade // Proc. of the ASME Turbo Expo 2006: Power for Land, Sea, and Air, Turbomachinery, Parts A and B. Vol. 6. 2006. P. 839–849. https://doi.org/10.1115/GT2006-90939
- Snedden G.C. The Application of Non-Axisymmetric Endwall Contouring in a 1½ Stage, Rotating Turbine: PhD thesis. Durham University, United Kingdom, 2011.
- Vázquez R., Fidalgo V.J. The effect of Reynolds and Mach number on end-wall profiling performance // Proc. of the ASME Turbo Expo 2010: Power for Land, Sea, and Air, Turbomachinery, Parts A, B, and C. Vol. 7. 2010. P. 1357–1368. https://doi.org/10.1115/GT2010-22765
- Du K., Jia Y., Song H., Chen L., Zhang Q., Cui T., Liu C. Effect of slot jet flow on non-axisymmetric endwall cooling performance of high-load turbines // Machines. 2023. V. 11. N 2. P. 134. https://doi. org/10.3390/machines11020134
- Schäflein L., Janssen J., Brandies H., Jeschke P., Behre S. Influence of purge flow injection on the performance of an axial turbine with three-dimensional airfoils and non-axisymmetric endwall contouring // Journal of Turbomachinery. 2023. V. 145. N 6. P. 061004. https:// doi.org/10.1115/1.4056238
- Menter F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications // AIAA — Journal. 1994. V. 32. N 8. P. 1598–1605. https://doi.org/10.2514/3.12149
- Menter F.R., Langtry R.B., Likki S.R., Suzen Y.B., Huang P.G., Völker S. A correlation-based transition model using local variables
 Part I: Model formulation // Journal of Turbomachinery. 2006. V. 128. N 3. P. 413–422. https://doi.org/10.1115/1.2184352
- Lynch S.P., Thole K.A. Heat transfer and film cooling on a contoured blade endwall with platform gap leakage // Journal of Turbomachinery. 2017. V. 139. N 5. P. 051002. https://doi. org/10.1115/1.4035202
- 26. Ingram G. Endwall Profiling for the Reduction of Secondary Flow in Turbines: PhD thesis. Durham University, United Kingdom, 2003.
- 27. Bai B., Li Z., Li J., Mao S., Ng W.F. The effects of axisymmetric convergent contouring and blowing ratio on endwall film cooling and

vane pressure side surface phantom cooling performance. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2022, vol. 144, no. 2, pp. 021020. https://doi.org/10.1115/1.4052500

- Versteeg H.K., Malalasekera W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method. Pearson Prentice Hall, 1995, 503 p.
- Snedden G., Dunn D., Backstrom V.T.W., Ingram G. Observations on the selection of objective function for the optimisation of turbine endwalls using computational fluid dynamics. *Proc. of the 7th South African Conference on Computational and Applied Mechanics* (*SACAM*), 2010, pp. 574–588.

Authors

Kozhikkatil Sunil Arjun — PhD, Post Doctoral Fellow, Cochin University of Science and Technology, Kochi, 682022, India, SC 57205762026, https://orcid.org/0000-0003-1832-3759, arjunks@cusat. ac.in

Porathoor Sunny Tide — PhD, Professor, Cochin University of Science and Technology, Kochi, 682022, India, SC 57216868077, https://orcid. org/0000-0002-8061-113X, tideps@cusat.ac.in

Received 27.09.2023 Approved after reviewing 01.11.2023 Accepted 17.11.2023 vane pressure side surface phantom cooling performance // Journal of Engineering for Gas Turbines and Power. 2022. V. 144. N 2. P. 021020. https://doi.org/10.1115/1.4052500

- Versteeg H.K., Malalasekera W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics. The Finite Volume Method. Pearson Prentice Hall, 1995. 503 p.
- Snedden G, Dunn D., Backstrom V.T.W., Ingram G. Observations on the selection of objective function for the optimisation of turbine endwalls using computational fluid dynamics // Proc. of the 7th South African Conference on Computational and Applied Mechanics (SACAM). 2010. P. 574-588.

Авторы

Арджун Кожиккатил Сунил — PhD, докторант, Кочинский университет науки и технологий, Кочи, 682022, Индия, **50** 57205762026, https://orcid.org/0000-0003-1832-3759, arjunks@cusat.ac.in

Тайд Поратур Сании — PhD, профессор, Кочинский университет науки и технологий, Кочи, 682022, Индия, sc 57216868077, https:// orcid.org/0000-0002-8061-113X, tideps@cusat.ac.in

Статья поступила в редакцию 27.09.2023 Одобрена после рецензирования 01.11.2023 Принята к печати 17.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1233-1241 УДК 001.8; 004.6

Методы бесконтактной регистрации информационных сигналов для аудита информационной безопасности систем и сетей электроснабжения Алексей Юрьевич Гришенцев¹^[22], Сергей Аркадьевич Арустамов²,

Алексей Юрьевич Гришенцев™, Сергей Аркадьевич Арустамов², Николай Сергеевич Кармановский³, Вячеслав Александрович Горошков⁴, Роман Ильич Чернов⁵

1,2,3,4,5 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ AGrishentsev@yandex.ru^{\begin}, https://orcid.org/0000-0003-1373-0670

² sergey.arustamov@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-7520-8987

³ karmanov50@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0533-9893

⁴ gorosvia@ya.ru, https://orcid.org/0000-0001-9950-5778

⁵ aeijo@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-9361-1238

Аннотация

Введение. Известно, что в системах и сетях электроснабжения присутствует информационный сигнал. Наличие информационных сигналов в силовых элементах систем и сетей электроснабжения (электротехнического сигнала) в совокупности с другой информацией позволяет извлекать вторичную информацию из систем и сетей электроснабжения. В некоторых случаях информация такого рода является конфиденциальной, имеет высокий уровень значимости, а объекты электроснабжения могут относиться к объектам критической информационной инфраструктуры. Таким образом, аудит и обеспечение информационной безопасности систем и сетей электроснабжения представляются актуальными. В этой связи важными являются вопросы выявления ранее не учтенных каналов возможной утечки конфиденциальной информации, разработки методов бесконтактного мониторинга информационной безопасности объектов генерации, транспортировки, трансформации и потребления электроэнергии. Метод. Предложен метод решения обратной задачи вычисления токов многопроводных длинных линий на основании бесконтактного измерения магнитного поля токов с учетом принципа наложения. Для реализации метода в применении к Q-проводной линии требуется одновременное измерение магнитного поля в Q различных точках с известными координатами. Также требуется знание координат проводов длинной линии. Геометрические измерения предлагается реализовывать с помощью лазерных дальномеров или сканеров. При измерении магнитного поля длинной линии учитывается квазипостоянная составляющая магнитного поля Земли. Предложен метод определения направления и задержки отражения бегущих волн в длинной линии на основании информации с двух датчиков магнитного поля, размещенных на достаточном расстоянии друг от друга вдоль линии. Основные результаты. Предложены методы обеспечения аудита и мониторинга состояния систем и сетей электроснабжения, находящихся под воздействием угроз нарушения информационной безопасности. Выполнено математическое моделирование предложенного метода бесконтактного измерения тока в длинной линии и натурные эксперименты измерения тока в длинной линии и регистрации бегущих волн. Результаты экспериментов показали точность предлагаемых методов достаточную для решения поставленных задач. Обсуждение. Работа развивает представление о методах и средствах обеспечения аудита и мониторинга информационной безопасности электрических систем и сетей. Результаты работы позволяют выявлять новые, ранее не учтенные каналы утечки информации и разрабатывать новые бесконтактные методы регистрации информационных сигналов в линиях электропередачи.

Ключевые слова

информационная безопасность, электрические системы и сети, аудит информационной безопасности

Ссылка для цитирования: Гришенцев А.Ю., Арустамов С.А., Кармановский Н.С., Горошков В.А., Чернов Р.И. Методы бесконтактной регистрации информационных сигналов для аудита информационной безопасности систем и сетей электроснабжения // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1233–1241. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1233-1241

[©] Гришенцев А.Ю., Арустамов С.А., Кармановский Н.С., Горошков В.А., Чернов Р.И., 2023

Methods of contactless registration of information signals for the audit of information security of power supply systems and networks Alexey Yu. Grishentsev¹⊠, Sergey A. Arustamov², Nikolay S. Karmanovsky³,

Vyacheslav A. Goroshkov⁴, Roman I. Chernov⁵

1,2,3,4,5 ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ AGrishentsev@yandex.ru^{\Box}, https://orcid.org/0000-0003-1373-0670

² sergey.arustamov@gmail.com, https://orcid.org/0000-0002-7520-8987

- ³ karmanov50@mail.ru, https://orcid.org/0000-0002-0533-9893
- ⁴ gorosvia@ya.ru, https://orcid.org/0000-0001-9950-5778

⁵ aeijo@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-9361-1238

Abstract

It is known that there is an information signal in power supply systems and networks. The presence of information signals in the power elements of power supply systems and networks (electrical signal) in combination with other information allows extracting secondary information from power supply systems and networks. In some cases, this kind of information is confidential, has a high level of significance, and power supply facilities may belong to critical information infrastructure facilities. Thus, auditing and ensuring information security of power supply systems and networks seem relevant. In this regard, the issues of identifying previously unaccounted for channels of possible leakage of confidential information, developing methods for contactless monitoring of information security of generation, transportation, transformation and electricity consumption facilities are important. A contactless method for recording and calculating spurious emissions in established operating modes and during transients in long lines is proposed by solving the inverse problem of calculating the currents of multi-wire long lines based on measuring their magnetic field, taking into account the principle of superposition. To implement the method in application to a Q-wire line, simultaneous measurement of the magnetic field at Q different points with known coordinates is required. It also requires knowledge of the coordinates of the wires with the length of the line. Geometric measurements are proposed to be implemented using laser rangefinders or scanners. When measuring the magnetic field of a long line, the quasi-constant component of the Earth's magnetic field is taken into account. A method is proposed for determining the direction and delay of reflection of traveling waves in a long line, based on information from two magnetic field sensors located at a sufficient distance from each other along the line. Methods are proposed to ensure the audit and monitoring of the state of power supply systems and networks that are under the influence of threats to information security violations. Mathematical modeling of the proposed method of contactless current measurement in a long line and field experiments of current measurement in a long line and registration of traveling waves are performed. The experimental results show the accuracy of the proposed methods sufficient to solve the tasks. The work develops an idea of methods and means of ensuring audit and monitoring of information security of electrical systems and networks. The results of the work make it possible to identify new, previously unaccounted for channels of information leakage and to develop new contactless methods for registering information signals in power transmission lines.

Keywords

information security, electrical systems and networks, information security audit

For citation: Grishentsev A.Yu., Arustamov S.A., Karmanovsky N.S., Goroshkov V.A., Chernov R.I. Methods of contactless registration of information signals for the audit of information security of power supply systems and networks. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1233–1241 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1233-1241

Введение

В ряде исследований [1, 2] показано, что в системах и сетях электроснабжения присутствует информационный сигнал, названный низкоэнтропийным. Низкоэнтропийный сигнал определяется как сигнал, зависящий от времени и имеющий малое значение статистического показателя — коэффициента вариабельности [1]. Источником низкоэнтропийного сигнала являются генераторы электрических мощностей. Кроме низкоэнтропийного сигнала, характерного для устоявшихся режимов работы электрических систем и сетей, в них периодически присутствуют сигналы с высокой энтропией, свойственные переходным процессам, в результате собственных (коммутации в электросети) и внешних (в виде молниевых разрядов в элементы электросети) воздействий. Наведенные токи и соответствующие им сигналы также могут вызывать магнитные бури [3]. Совокупность всех информационных сигналов, присутствующих в электрических сетях, предлагается называть электротехническими сигналами [1].

Наличие информационных сигналов в силовых элементах систем и сетей электроснабжения дает право уточнить название таких энергетических сетей, называя их энергоинформационными.

Электротехнический сигнал является источником следующей информации, которую будем называть первичной:

- качество и соответствие требованиям стандартов сети по частоте, амплитуде и форме (числу и распределению гармонических компонент в составе спектра сигнала), разности фаз тока и напряжения, разности фаз в фазных проводниках;
- передаваемые и потребляемые мощности;
- расписание и энергетические режимы работы систем генерации, передачи, трансформации и потребления электрических мощностей;
- наличие неоднородностей длинных линий, обусловленных несогласованностью волновых, нагрузоч-

ных сопротивлений и сопротивлений генерирующих источников;

 направление распространения бегущих волн, коэффициенты затухания и фазы, удаленность от места измерения точек отражения и переотражения бегущих волн.

Анализ электротехнического сигнала в совокупности с информацией о виде и назначении промышленных потребителей, типе электрических станций, подстанций трансформации и пр., позволяет извлекать вторичную информацию из систем и сетей электроснабжения, например, о режимах работы, генерируемых, потребляемых, трансформируемых и/или передаваемых мощностях, значимости тех или иных элементов и узлов систем электроснабжения для хозяйственной деятельности и обороноспособности. В некоторых случаях информация такого рода является конфиденциальной, имеет высокий уровень значимости, а объекты, с электроснабжением которых связан электротехнический сигнал, могут относиться к объектам критической информационной инфраструктуры¹ (КИИ).

Вследствие того, что в силовых узлах систем и сетей электроснабжения циркулируют значительные токи при высоких уровнях напряжений, часть перечисленной информации можно извлечь бесконтактно, на удаленном расстоянии от силовых токоведущих элементов за счет возбуждаемого электромагнитного поля. Значительные масштабы распределенных систем и сетей электроснабжения способствуют их демаскировке и позволяют получать информацию визуально. Так, например, в случае использования воздушных линий электропередачи (ЛЭП) напряжение передаваемой электроэнергии можно достаточно точно определить по типу и числу изоляторов в гирлянде, типу используемой линейной арматуры, наличию и числу жил в расщепленном проводе, типу опор, расстоянию между фазными проводами [4]. Картирование ЛЭП позволяет делать обоснованные предположения и выводы о территориальном расположении потребителей и источников электроэнергии, наличии резервирования питания и пр. Подобная информация может иметь особенное значение в период вероятного физического воздействия на элементы и узлы систем и сетей электроснабжения, например, в критических ситуациях, связанных с их целенаправленным выводом из строя.

В результате анализа работ [5–7] можно сделать вывод о значимости мониторинга, аудита и обеспечения информационной безопасности (ИБ) электрических систем и сетей.

В настоящей работе рассмотрены вопросы разработки методов бесконтактного мониторинга и выявления ранее не учтенных каналов возможной утечки конфиденциальной информации для повышения ИБ объектов генерации, транспортировки, трансформации и потребления электроэнергии как элементов и узлов электрических систем и сетей.

Этапы аудита и мониторинга информационной безопасности систем и сетей электроснабжения

На сегодняшний день существует несколько определений термина аудит в контексте ИБ. Например, в работе [8] выполнен сравнительный анализ четырех² определений [9-10], на основании которого отдано обоснованное предпочтение следующему определению (ИСО 19011-2011): «Аудит информационной безопасности — систематический, независимый и документируемый процесс получения оценок состояния ИБ объекта аудита и объективного их оценивания с целью установления степени соответствия критериям аудита». В новой редакции стандарта³ определение понятия аудит следующее: «Аудит — систематический, независимый и документированный процесс установления объективного свидетельства и его объективного оценивания для получения степени соответствия критериям аудита».

Современные системы и сети электроснабжения имеют развитую распределенную структуру и управляются административными субъектами генерации, транспорта, трансформации и поставки электроэнергии конечному потребителю. Мониторинг и управление электрическими сетями проводится за счет слаботочных проводных сетей и радиоканалов информационно-управляющих сетей. Значительная часть управляющих воздействий в электросетях осуществляется техническим персоналом.

Аудит и мониторинг ИБ производятся на основании технического задания. Предлагаемая последовательность аудита ИБ систем и сетей электроснабжения приведена на рис. 1.

С учетом рассмотренных потенциальных каналов утечки информации из сильноточных цепей систем электроснабжения определим базовые группы потенциальных объектов атак и потенциальных каналов утечки информации.

После сбора данных первичного анализа результатов аудита ИБ систем и сетей электроснабжения производится их интегральная обработка и систематизация. Далее производится оценка ущерба в результате физических и информационных атак на объекты инфраструктуры электрических систем и выработка мер противодействия угрозам вероятных атак и на объекты инфраструктуры электрических систем и сетей. На заключительном этапе аудита формируется перечень предписаний и рекомендаций, направленных на повышение ИБ и снижение вероятности реализации угроз. При необходимости осуществляется мониторинг реализации предписаний и рекомендаций, направленных на повышение ИБ и снижение вероятности реализации угроз.

¹ Методические рекомендации по определению и категорированию объектов критической информационной инфраструктуры топливно-энергетического комплекса. М.: ФСТЭК России и Минэнерго России, 2019. 39 с.

² Астахов А. Введение в аудит информационной безопасности. Global Trust Solutions [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://globaltrust.ru/category/prezentaczii/page/7/, свободный. Яз. рус. (дата обращения: 10.10.2023).

³ ГОСТ Р ИСО 19011-2021. Оценка соответствия. Руководящие указания по проведению аудита систем менеджмента. Введен 07.01.2021. М.: Стандартинформ, 2021. 49 с.



Puc. 1. Общая последовательность аудита информационной безопасности систем и сетей электроснабжения *Fig. 1.* The general sequence of the audit of information security systems and power supply networks

Отметим, что технология аудита и мониторинга [11] информационно-управляющих сетей, действующих в составе систем и сетей электроснабжения мало чем отличается от аудита и мониторинга прочих информационно-управляющих сетей. Подобные задачи хорошо проработаны¹ и регламентированы², имеется достаточное число методов и средств подобного аудита [12–14]. Изучены вопросы аудита объектов и субъектов администрирования [9, 10] и технического обслуживания. Анализ уязвимостей ИБ высокочастотных сигналов, передающихся по силовым высоковольтным ЛЭП [15] и используемым для передачи сообщений телеметрии и диспетчерского управления электрическими системами и сетями также требует отдельного анализа, как с точки зрения ИБ, так и с учетом электромагнитной совместимости [16]. При этом низкочастотной электротехнический сигнал, имеющий значительную амплитуду, хорошо отделим от высокочастотного сигнала, имеющего обычно существенно меньшую амплитуду. В аспекте ИБ отдельного рассмотрения, выходящего за рамки настоящей работы, заслуживает внимания технология интеграции волоконно-оптического кабеля в проводники ЛЭП³, обычно в грозозащитный провод.

Анализ проблемы ИБ показал, что еще недостаточно проработан вопрос обеспечения аудита и мониторинга силовых систем и сетей электроснабжения, действующих как под управлением энергетических предприятий и поставщиков электроэнергии, так и под управлением конечного потребителя. Остановимся далее на вопросе обеспечения и поддержке аудита и мониторинга силовых систем и сетей электроснабжения.

¹ Методический документ. Меры защиты информации в государственных информационных системах. М.: ФСТЭК России, 2014. 176 с.

² ГОСТ Р ИСО/МЭК 17799-2005. Информационная технология. Практические правила управления информационной безопасностью. Введен 01.01.2007. М.: Стандартинформ, 2006. 62 с.

³ ВОЛС на воздушных линиях электропередачи [Электронный pecypc]. Режим доступа: https://www.ruscable.ru/ article/vols_na_vozdushnykh_liniyakh_elektropere, свободный. Яз. рус. (дата обращения: 10.10.2023).

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

Методы детектирования электротехнического сигнала

Контактные методы регистрации электротехнического сигнала основаны на физическом подключении к силовым сетям. Применение контактных методов требует непосредственного доступа к элементам и узлам электрических систем и сетей, что является ограничивающим фактором, например, при необходимости проведения скрытого мониторинга и аудита. Для контактного мониторинга вполне применимы приборы, используемые при техническом мониторинге и обслуживании электрических сетей. После проверки корректности подключения и адекватности показаний для аудиторского мониторинга можно использовать штатные приборы, установленные в электрических системах и сетях.

Вместе с тем контактным методам измерений свойственны определенные недостатки. Существует необходимость доступа к силовым элементам и узлам электрических систем и сетей. Необходимо согласование выполнения измерений с административными и техническими службами электрических систем и сетей. Отсутствует возможность скрытых приборных измерений.

Бесконтактные методы основаны на существующей возможности удаленных измерений электротехнического сигнала, а значит, предоставляют возможности, недоступные контактным методам. К ним относится возможность проводить независимый аудит без согласования с административными и техническими службами электрических систем и сетей. Бесконтактные методы позволяют производить измерения на значительном удалении от силовых токоведущих элементов электрических систем и сетей.

Отметим, что большинство технических средств ИБ являются средствами двойного назначения. Они могут применяться для аудита и мониторинга ИБ, но также использоваться как средства информационной атаки для получения доступа к информации.

Бесконтактный дистанционный метод измерений токов в устоявшихся режимах работы и при переходных процессах. Вектор магнитной индукции от времени $\mathbf{B}_{q,p}(t)$ в точке с координатами (x_p, y_p) для уединенного провода с током $i_q(t)$ и координатами осевой линии (x_q, y_q) вычислим с помощью выражения [17]:

$$\mathbf{B}_{q,p}(t) = \mathbf{x}B_{q,p,x}(t) + \mathbf{y}B_{q,p,y}(t) =$$

$$= \mu i_q(t) \frac{\mathbf{x}\cos\theta_{q,p} + \mathbf{y}\sin\theta_{q,p}}{2\pi(\sqrt{(x_p - x_q)^2 + (y_p - y_q)^2})},$$
(1)

где $\mu = \mu_1 \mu_0$ — абсолютная магнитная проницаемость среды; μ_1 — относительная магнитная проницаемость среды; μ_0 — магнитная постоянная; q, p = 1, ..., Q — целочисленные индексы; $\theta_{q,p}$ — полярный угол, характеризующий положение (x_p, y_p) относительно (x_q, y_q) , причем (x_q, y_q) принимается за точку, через которую проходит полярная ось; **x** и **y** — направляющие векторы по осям Ox и Oy.

Используя принцип наложения (суперпозиции), в случае *Q*-проводной ЛЭП, учитывая (1), получим выражение:

$$\mathbf{B}_{p}(t) = \sum_{q=1}^{Q} \mathbf{B}_{q,p}(t).$$
(2)

Используя выражение (2), предлагается метод решения следующей обратной задачи: при известном значении магнитной индукции $\mathbf{B}_p(t)$ в p — точках (p, q = 1, ..., Q), можно вычислить токи $i_q(t)$ в отдельных проводниках Q-проводной ЛЭП. Для решения обратной задачи запишем систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) в матричном виде:

$$\mathbf{AI} = \mathbf{B},\tag{3}$$

где $\mathbf{A} = (a_{q,p}) = \mu \frac{\mathbf{x} \cos \theta_{q,p} + \mathbf{y} \sin \theta_{q,p}}{2\pi \left(\sqrt{(x_p - x_q)^2 + (y_p - y_q)^2}\right)}$ — матрица коэффициентов СЛАУ; $\mathbf{B} = \mathbf{B}_p(t)$ — вектор магнитной

коэффициентов СЛАУ; $\mathbf{B} = \mathbf{B}_p(t)$ — вектор магнитной индукции; $\mathbf{I} = i_q(t)$ — вектор токов в отдельных проводниках *Q*-проводной ЛЭП. Решением СЛАУ (3) будет: $\mathbf{I} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}$.

Для решения СЛАУ (3) и вычисления значений токов $i_q(t)$ в отдельных проводниках Q-проводной ЛЭП измерим вектора магнитной индукции $\mathbf{B}_p(t)$ в Q различных точках (x_p, y_p) . Для вычисления элементов матрицы **A** измерим координату Q точек (x_p, y_p) и координату точек (x_q, y_q) , через которые проходят Q проводники с токами $i_q(t)$. Произвести подобные измерения с достаточно высокой точностью возможно с помощью лазерного дальномера или системы лазерного сканирования. Определить напряжение в воздушной длинной линии можно по наличию и конфигурации расщепленного провода, по типу и числу изоляторов в гирлянде.

Следует отметить, что наличие магнитных неоднородностей среды, например расположение ЛЭП над поверхностью земли или воды, может значительно повлиять на форму магнитного поля, а значит, и на точность измерений. В таком случае необходимо внести поправки в значения магнитной индукции, которые можно определить с помощью моделирования картины поля, используя уравнения Лапласа. Дополнительно повысить точность измерения токов $i_q(t)$ в Q линиях проводников можно за счет учета квазистационарного вектора магнитной индукции магнитного поля Земли. При переменном электротехническом сигнале компонента магнитного поля Земли легко обнаружима как постоянная составляющая.

Предлагаемый метод эффективно применим в условиях, когда сигнал, за счет которого регистрируется магнитное поле ЛЭП, хорошо различим на фоне сигналов, генерируемых магнитным полем других источников. Для оценки дистанций, на которых применим метод, построены графики зависимости затухания магнитной индукции уединенного протяжного проводника с током от расстояния (*r*) для значений токов 10 A, 100 A, 1кA, 5 кA, 10 кA (рис. 2).

Бесконтактный дистанционный метод регистрации бегущих волн в длинной линии. Метод бесконтактного извлечения информации позволяет получить



Рис. 2. Зависимость модуля индукции магнитного поля от расстояния для уединенного проводника круглого сечения с током. Синим цветом отмечена средняя интенсивность магнитного поля Земли, которая колеблется от 25 до 65 мкТл¹



сведения о направлении движения, скорости и амплитуде бегущей прямой и отраженной волн. Для определения абсолютных значений токов бегущих волн можно использовать метод, предложенный в подразделе «Бесконтактный дистанционный метод измерений токов в устоявшихся режимах работы и при переходных процессах». Метод основан на размещении двух датчиков 1, 2 магнитного поля вдоль длинной линии, подключенных к общему самописцу 3 (рис. 3). В качестве датчиков предлагается использовать магнитные антенны, которые имеют достаточно высокую чувствительность и быстродействие.

Известно, что скорость волны в неискажающей однородной длинной линии $v = 1/\sqrt{LC}$, где L — погонная индуктивность длинной линии; C — погонная емкость длинной линии. При необходимости скорость распространения волны можно уточнить, зная расстояние между датчиками (рис. 3) или по справочникам первичных и вторичных характеристик длинной линии, предоставляемым с контактными рефлектометрами.

Распространение бегущих волн при переходных процессах происходит волновым пакетом, в результате которого датчики позволяют измерить групповую скорость волнового пакета. По направлению распространения падающей волны определяется направление к источнику волнового пакета. При регистрации отраженной волны по длительности задержки оценивается время распространения волны до места отражения. Источниками волновых пакетов могут быть коммутационные устройства и грозовые разряды.

Значительные габариты и пространственные масштабы систем и сетей электроснабжения позволяют извлекать дополнительную информацию с помощью непосредственного визуального наблюдения объектов электрических сетей и картирования с помощью



Рис. 3. Схема измерения бегущих волн в длинной линии: 1, 2 — датчики магнитного поля; 3 — самописец

Fig. 3. Measuring circuit of traveling waves in a long line: *1, 2* — magnetic field sensors, *3* — recorder

картографических сервисов, например, Google Maps², Яндекс карт³ и пр. Особенно уязвимы к такому виду извлечения информации воздушные ЛЭП, открытые распределительные устройства и трансформаторные подстанции, крупные электростанции и потребители электроэнергии.

Результаты экспериментов

Численное моделирование и решения обратной задачи вычисления токов в длинной линии. Для проверки разработанных методов выполнено численное моделирование в программном пакете Wolfram Mathematica. Расчеты сопоставлены с результатами натурного эксперимента.

Расположение трех фаз проводников с токами $i_1(t)$, $i_2(t)$, $i_3(t)$ воздушной ЛЭП 110 кВ и датчиков D₁, D₂ и D₃ индукции магнитного поля показано на рис. 4. Шаг сетки на рисунке соответствует 1 метру. Каждый датчик регистрирует две компоненты магнитной индукции от времени — $B_x(t)$ и $B_y(t)$.

Моделирование выполнено в следующем порядке. Фазные токи приняты равными $i_1(t) = A_0 \cos(2\pi f t)$, $i_2(t) = A_0 \cos(2\pi f t + 2\pi/3)$, $i_3(t) = A_0 \cos(2\pi f t + 4\pi/3)$, где $A_0 = 75 \text{ A}$ — амплитуда тока; f = 50 Гц — частота напряжения. В точках размещения датчиков в соответствии с (2) произведен расчет суммарного вектора магнитной индукции (от тока каждой фазы). К каждой компоненте вектора данных магнитной индукции $B_x(t)$ и $B_y(t)$ полученной с датчиков, добавлен случайный гауссов шум с



Рис. 4. Схема расположения трех фаз проводников воздушной линии электропередачи и датчиков индукции магнитного поля

Fig. 4. The location of the three phases of the air transmission line conductors and magnetic field induction sensors

¹ Geomagnetism Frequently Asked Questions. National Centers for Environmental Information (NCEI). [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.ncei.noaa.gov/products/ geomagnetism-frequently-asked-questions, свободный. Яз. англ. (дата обращения: 08.10.2023).

² https://www.google.com/

³ https://yandex.ru/maps



Puc. 5. Значения компонентов магнитной индукции $B_x(t)(a)$ и $B_y(t)(b)$ в точках расположения датчиков D₁, D₂ и D₃ *Fig. 5.* Values of magnetic induction components $B_x(t)(a)$ and $B_y(t)(b)$ at the locations of sensors D₁, D₂ and D₃

нулевым средним значением и спектральной плотностью шума $N_0 = 2\sigma^2 = 1,62 \cdot 10^{-9} \text{ Тл}^2/\Gamma ц, \sigma$ — среднеквадратичное отклонение распределения гауссова шума. Полученные данные использованы для вычисления токов в фазных проводниках.

Расчетные значения магнитной индукции в точках расположения датчиков D_1 , D_2 и D_3 приведены на рис. 5.

Решая системы уравнений (3) с использованием полученных данных, получим значения токов $i_1(t)$, $i_2(t)$, $i_3(t)$ в фазных проводниках воздушной ЛЭП (рис. 6).

По графикам (рис. 6) заметно, что фазовый ток $i_3(t)$ наименее зашумлен, так как датчики к нему расположены ближе, чем к другим проводникам. Наиболее зашумлен фазовый ток $i_1(t)$, так как датчики от проводника расположены на наибольшем удалении.

Измерение токов в длинной двухпроводной линии. На рис. 7 приведена схема двухпроводной линии с указанием расположения проводников с током $i_1(t) =$ $= -i_2(t) = i_n(t)$ и датчика Холла (D). Плоскость датчика Холла располагалась перпендикулярно вектору магнитной индукции. На практике положение, перпендикулярное вектору магнитной индукции, можно определить по максимуму амплитудных значений переменной компоненты показаний датчика.

Амплитудное значение сигнала с датчика Холла $(U_{\rm gX})$ составляет 2,75 В при постоянной составляющей на датчике, обусловленной индукцией магнитного поля Земли 1,49 В. Таким образом, амплитуда сигнала, обусловленная током в линии, составляет $U_{\rm gX}$ = 1,26 В,



Puc. 6. Графики значений фазных токов в проводниках *Fig.* 6. Graphs of current values in phase conductors

что соответствует модулю вектора магнитной индукции $|{\bf B}|\approx 0{,}2016~{\rm mTr.}$

Учитывая (2), и что датчики расположены на одной оси вдоль двухпроводной линии, запишем выражение для мгновенного значения тока в линии

$$i_{\rm fl}(t) = 2 \frac{\pi |\mathbf{B}|}{\mu_0} \left(\frac{\cos \theta_1}{\sqrt{\Delta x_1^2 + \Delta y_1^2}} + \frac{\cos \theta_2}{\sqrt{\Delta x_2^2 + \Delta y_2^2}} \right)^{-1}$$

При заданных в эксперименте геометрических параметрах (рис. 7) $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 1,5 \cdot 10^{-3}$ м, $\Delta y = 5 \cdot 10^{-3}$ м и $\theta_1 = \theta_2 \approx 0,287$ рад, получим значение действующего тока $I_{\pi} \approx 6,474$ А. При действующем значении напряжения в сети 220 В получим значение мощности $p \approx 1,42$ кВт. При этом фактическая мощность нагрузки составила 1,5 кВт. Таким образом, погрешность моделирования по данным экспериментальных измерений не превышает 5,3 %.



Рис. 7. Расположение точки измерений и конфигурации проводников длинной линии

Fig. 7. Location of the measurement point and configuration of line length conductors

Бесконтактная регистрация бегущих волн в длинной линии. В качестве регистратора использован осциллограф АКИП-4115/4А. В нагруженную активным сопротивлением 0,05 Ом линию подавался единичный импульс с амплитудой 15 В. Фактическая длина линии составила 33,2 м и была выполнена из двухпроводного кабеля ПВС. На рис. 8 приведена осциллограмма бегущих волн в длинной линии, полученная с помощью непосредственного (контрольного) измерения напряжения $u_n(t)$ и регистрации магнитной компоненты электромагнитного поля с помощью магнитной антенны $u_{ma}(t)$. Хорошо видно, что на осциллограмме напряжения $u_n(t)$ присутствуют первая прямая волна и две отраженные волны с измененными фазами на стороне приемника.

На осциллограмме $u_{\rm Ma}(t)$ видно, что инверсия сигнала на стороне приемника отсутствует, что характерно при включении нагрузки с малым сопротивлением и близко к режиму «короткого замыкания». Первичные и вторичные характеристики длинной линии можно вычислить, используя известные выражения [17, 18]. Скорость распространения фронта электромагнитной волны в линии составляет $v \approx 0,1526 \cdot 10^9$ м/с. Расчетная длина линии (в данном случае — расстояние от источника до нагрузки) при общем времени распространения прямой и обратной волны $T = 0,433 \cdot 10^{-6}$ с (по началу фронта волн), составляет $l_{\rm лин} \approx 33,04$ м. Таким образом, ошибка оценки длины линии не превысила 0,5 %.

Предложенный метод регистрации бегущих волн в длинной линии с помощью двух разнесенных датчиков позволил измерить с высокой точностью скорость распространения волнового пакета, а значит, оценить значения запаздывания отраженных волн даже в случае, если свойства линии не известны, например, если проложен подземный кабель или кабель внутри зданий и сооружений, информация о типе которого неизвестна.

Результаты моделирования и натурных экспериментов показали, что предложенные методы бесконтактных

Литература

- Коровкин Н.В., Грицутенко С.С. Введение понятия «низкоэнтропийный сигнал» // Электричество. 2020. № 10. С. 33–43. https:// doi.org/10.24160/0013-5380-2020-10-33-43
- Коровкин Н.В., Грицутенко С.С. О применимости быстрого преобразования Фурье для гармонического анализа несинусоидальных токов и напряжений // Известия Российской академии наук. Энергетика. 2017. № 2. С. 73–86.
- Gaunt C.T. Reducing uncertainty responses for electricity utilities to severe solar storms // Journal of Space Weather and Space Climate. 2014. V. 4. P. A01. https://doi.org/10.1051/swsc/2013058
- Идельчик В.И. Электрические системы и сети. М.: Энергоатомиздат, 1989. 594 с.
- Бурлов В.Г., Маньков В.Д., Полюхович М.А. Теоретические аспекты синтеза модели управления безопасностью электрических сетей с применением ГИС // Региональная информатика (РИ-2020). XVII Санкт-Петербургская международная конференция. Материалы конференции. Ч. 2. СПб., 2020. С. 229–230.
- Рушечников Я.И., Яновский А.В., Третьяков И.А. Программноаппаратное обеспечение исследования электромагнитных излучений, создаваемых вычислительной техникой, в бытовой электрической сети // Вестник Астраханского государственного технического университета. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика. 2023. № 2. С. 75–84. https://doi. org/10.24143/2072-9502-2023-2-75-84



Рис. 8. Фактическое напряжение $u_{n}(t)$ в длинной линии и напряжение $u_{ma}(t)$ с датчика — магнитная антенна Fig. 8. The actual voltage $u_{n}(t)$ in the long line and the voltage $u_{ma}(t)$ from the sensor — magnetic antenna

измерений дают возможность достичь необходимую точность решения поставленной задачи приборного аудита и мониторинга ИБ силовых элементов и узлов электрических сетей.

Заключение

Разработан бесконтактный метод измерений токов в устоявшихся режимах работы и при переходных процессах в длинных линиях за счет решения обратной задачи вычисления токов многопроводных длинных линий на основании измерения их магнитного поля с учетом принципа суперпозиции. Предложен бесконтактный метод измерения направления и задержки отражения бегущих волн в длинной линии. Показаны ранее не учтенные каналы утечки информации из электрических систем и сетей, а также способы их регистрации.

References

- Korovkin N.V., Gritsutenko S.S. Introduction of the low-entropy signal concept. *Elektrichestvo*, 2020, no. 10, pp. 33–43. (in Russian). https://doi.org/10.24160/0013-5380-2020-10-33-43
- Korovkin N.V., Gritsutenko S.S. About applicability of the fast fourier transform for a harmonic analisys of non sinusoidal currents and voltages. *Izvestija Rossijskoj akademii nauk. Jenergetika*, 2017, no. 2, pp. 73–86. (in Russian)
- Gaunt C.T. Reducing uncertainty responses for electricity utilities to severe solar storms. *Journal of Space Weather and Space Climate*, 2014, vol. 4, pp. A01. https://doi.org/10.1051/swsc/2013058
- 4. Idelchik V.I. *Electrical Systems and Networks*. Moscow, Jenergoatomizdat Publ., 1989, 594 p. (in Russian)
- Burlov V., Mankov V., Polyukhovich M. Theoretical aspects of synthesis of the electric power networks safety management model using GIS. *Regional informatics (RI-2020). XVII St. Petersburg Internatonal Conference. Proceedings of the Conference. Part 2.* 2020, pp. 229–230. (in Russian)
- Rushechnikov I.I., Ianovskii A.V., Tretiakov I.A. Software and hardware for studying electromagnetic radiation generated by computing equipment in household electric network. *Vestnik of Astrakhan State Technical University. Series: Management, computer science and informatics*, 2023, no. 2, pp. 75–84. (in Russian). https:// doi.org/10.24143/2072-9502-2023-2-75-84

- Осак А.Б., Бузина Е.Я. Анализ влияния киберуязвимостей систем релейной защиты, противоаварийной и режимной автоматики на надежность электро-снабжения потребителей в условиях цифровой трансформации электроэнергетики // Методические вопросы исследования надежности больших систем энергетики. Материалы 93-го заседания семинара. В 2-х кн. Книга 2. Иркутск, 2021. С. 310–319.
- Макаренко С.И. Аудит информационной безопасности: основные этапы, концептуальные основы, классификация мероприятий // Системы управления, связи и безопасности. 2018. № 1. С. 1–29. https://doi.org/10.24411/2410-9916-2018-10101
- Аверченков В.И., Рытов М.Ю., Кувыклин А.В., Рудановский М.В. Аудит информационной безопасности органов исполнительной власти / 3-е изд., стереотип. М.: ООО «ФЛИНТА», 2011. 100 с.
- Хомяков В.А. Аудит как метод модернизации системы обеспечения информационной безопасности // Экономический вестник Ярославского университета. 2013. № 29. С. 48–52.
- Макаренко С.И. Аудит безопасности критической инфраструктуры специальными информационными воздействиями: монография. СПб.: Наукоемкие технологии, 2018. 122 с.
- 12. Бойко А.А., Обущенко Е.Ю., Щеглов А.В. Особенности синтеза полного множества тестовых способов удаленного информационно-технического воздействия на пространственно распределенные системы информационно-технических средств // Вестник Воронежского государственного университета. Серия: Системный анализ и информационные технологии. 2017. № 2. С. 33–45.
- Бегаев А.Н., Бегаев С.Н., Федотов В.А. Тестирование на проникновение. СПб: Университет ИТМО, 2018. 45 с.
- Нырков А.П., Рудакова С.А. Методика аудита объектов информатизации по требованиям информационной безопасности // Журнал Университета водных коммуникаций. 2012. № 3. С. 146– 149.
- Аксенов И.И., Мба Э.К. Разработка системы мониторинга воздушных линий электропередачи 110 кВ // Энергоэффективность и энергосбережение в современном производстве и обществе: материалы международной научно-практической конференции. Ч. 1, 2022. С. 51–64.
- 16. Комаров С. Беда пришла, откуда не ждали... // Broadcasting. Телевидение и радиовещание. 2005. № 7. С. 71–72 [Электронный ресурс]. URL: http://lib.broadcasting.ru/articles2/Oborandteh/grief_ сате, свободный, Яз. рус. (дата обращения: 10.10.2023).
- Демирчян К.С., Нейман Л.Р., Коровкин Н.В., Чечурин В.Л. Теоретические основы электротехники Т. 3 / 4-е изд. СПб.: Питер, 2006. 377 с.
- Калантаров П.Л., Цейтлин Л.А. Расчёт индуктивностей: справочная книга / 3-е изд., перераб. и доп. Л.: Энергоатомиздат, 1986. 488 с.

Авторы

Гришенцев Алексей Юрьевич — доктор технических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, sc 56321138400, https://orcid.org/0000-0003-1373-0670, AGrishentsev@yandex.ru

Арустамов Сергей Аркадьевич — доктор технических наук, профессор, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, вс 59695216400, https://orcid.org/0000-0002-7520-8987, sergey.arustamov@gmail.com

Кармановский Николай Сергеевич — кандидат технических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, sc 57192385103, https://orcid.org/0000-0002-0533-9893, karmanov50@mail.ru

Горошков Вячеслав Александрович — аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid. org/0000-0001-9950-5778, gorosvia@ya.ru

Чернов Роман Ильич — инженер, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-9361-1238, aeijo@mail.ru

Статья поступила в редакцию 10.10.2023 Одобрена после рецензирования 06.11.2023 Принята к печати 25.11.2023

- Osak A.B., Buzina E.Y. Analysis of the cyber vulnerabilities impact of relay protection systems, emergency and regime automation on the reliability of consumers power supply in the context of the power industry digital transformation. *Methodological issues in researching* the reliability of the large energy systems. Materials from the 93th seminar meeting. Irkutsk, 2021, pp. 310–319. (in Russian)
- Makarenko S.I. Audit of information security the main stages, conceptual framework, classification of types. *Systems of Control, Communication and Security*, 2018, no. 1, pp. 1–29. (in Russian). https://doi.org/10.24411/2410-9916-2018-10101
- 9. Averchenkov V.I., Rytov M.Iu., Kuvyklin A.V., Rudanovskii M.V. Information Security Audit of the Executive Authorities. Moscow, FLINTA Publ., 2011, 100 p. (in Russian)
- Homyakov V.A. Audit is as a method of modernization in provision system of information security. *Jekonomicheskij vestnik Jaroslavskogo universiteta*, 2013, no. 29, pp. 48–52. (in Russian)
- Makarenko S.I. Security Audit of the Critical Infrastructure Using Special Information Influences. St. Petersburg, Naukoemkie tehnologii Publ., 2018, 122 p. (in Russian)
- Boyko A.A., Obushenko E.Y., Shcheglov A.V. About synthesis of a full set of test methods of remote information-technical impacts on spatially distributed systems of information-technical tools. *Proceedings of Voronezh State University. Series: Systems Analysis* and Information Technologies, 2017, no. 2, pp. 33–45. (in Russian)
- Begaev A.N., Begaev S.N., Fedotov V.A. *Penetration Testing*. St. Petersburg, ITMO University, 2018, 45 p. (in Russian)
- 14. Nyrkov A.P., Rudakova S.A. The technique of audit of information objects for information security requirements. *Zhurnal Universiteta vodnyh kommunikacij*, 2012, no. 3, pp. 146–149. (in Russian)
- Aksenov I.I., Mbah E.Ch. Development of a 110 kV overhead transmission line monitoring system. *Energy efficiency and energy* saving in the modern production and society: materials of the International Scientific and Practical Conference. Part. 1, 2022, pp. 51–64. (in Russian)
- Komarov S. The trouble has come from where it was not expected ... Broadcasting, 2005, no. 7, pp. 71–72. Available at: http://lib. broadcasting.ru/articles2/Oborandteh/grief_came. (accessed: 10.10.2023). (in Russian)
- Demirchian K.S., Neiman L.R., Korovkin N.V., Chechurin V.L. *Theoretical Basics of Electrical Engineering. V. 3.* St. Petersburg, Piter Publ., 2006, 337 p. (in Russian)
- Kalantarov P.L., Tceitlin L.A. Inductance Calculation. Reference Book. Leningrad, Jenergoatomizdat Publ., 1986, 488 p. (in Russian)

Authors

Alexey Yu. Grishentsev — D.Sc., Associate Professor, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, se 56321138400, https://orcid.org/0000-0003-1373-0670, AGrishentsev@yandex.ru

Sergey A. Arustamov — D.Sc., Full Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, sc 59695216400, https://orcid. org/0000-0002-7520-8987, sergey.arustamov@gmail.com

Nikolay S. Karmanovsky — PhD, Associate Professor, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, Sc 57192385103, https://orcid.org/0000-0002-0533-9893, karmanov50@mail.ru

Vyacheslav A. Goroshkov — PhD Student, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-9950-5778, gorosvia@ya.ru

Roman I. Chernov — Engineer, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-9361-1238, aeijo@mail.ru

Received 10.10.2023 Approved after reviewing 06.11.2023 Accepted 25.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial» **I/İTMO**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

NHOOPMAUNOHHIJIX TEXHONOFINÄ, MEXAHNKN N ONTNKN

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ BRIEF PAPERS

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1242-1246 УДК 681.51.015

Оценивание параметров синхронного двигателя с постоянными магнитами Антон Александрович Пыркин^{1⊠}, Алексей Алексеевич Ведяков², Антон Кириллович Голубев³

1,2,3 Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

¹ pyrkin@itmo.ru^{\equiv}, https://orcid.org/0000-0001-8806-4057

² vedyakov@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-4336-1220

³ akgolubev@itmo.ru, https://orcid.org/0009-0008-6951-2799

Аннотация

Рассмотрена задача оценивания параметров неявнополюсного синхронного двигателя с поверхностно установленными постоянными магнитами. Предложена параметризация нелинейной модели двигателя, позволяющая получить регрессионное соотношение с использованием измеренных (вычисленных) значений силы тока и напряжения в обмотках статора и углового положения ротора. С помощью метода динамического расширения и смешивания регрессора синтезирован алгоритм оценивания искомых параметров за конечное время.

Ключевые слова

синхронный двигатель с постоянными магнитами, динамическая параметризация модели, оценивание параметров

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение № 075-11-2023-015 от 10.02.2023, «Создание высокотехнологичного серийного производства энергоэффективных синхронных электродвигателей со встроенным интеллектуальным датчиком положения и функциями самодиагностики для робототехники и цифровых систем автоматизации».

Ссылка для цитирования: Пыркин А.А., Ведяков А.А., Голубев А.К. Оценивание параметров синхронного двигателя с постоянными магнитами // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1242–1246. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1242-1246

Parameter estimation of permanent magnet synchronous motor

Anton A. Pyrkin^{1⊠}, Alexey A. Vedyakov², Anton K. Golubev³

1,2,3 ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

¹ pyrkin@itmo.ru^{\exists}, https://orcid.org/0000-0001-8806-4057

² vedyakov@itmo.ru, https://orcid.org/0000-0003-4336-1220

³ akgolubev@itmo.ru, https://orcid.org/0009-0008-6951-2799

Abstract

The problem of estimating the parameters of non-salient synchronous motor with surface-mounted permanent magnets is considered. A parameterization of a nonlinear motor model is proposed, which allows obtaining a linear regressor equation using measured (estimated) values of current and voltage in the stator windings and the angular rotor position. Using the method of dynamic regressor extension and mixing, an algorithm for estimating the desired parameters in finite time is designed.

Keywords

synchronous motor with permanent magnets, dynamic parameterization of the model, parameter estimation

Acknowledgements

The work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation, Agreement No. 075-11-2023-015, 10.02.2023, "Creation of high-tech serial production of energy-efficient synchronous electric motors with integrated intelligent position sensor and self-diagnosis functions for robotics and digital automation systems".

© Пыркин А.А., Ведяков А.А., Голубев А.К., 2023

For citation: Pyrkin A.A., Vedyakov A.A., Golubev A.K. Parameter estimation of permanent magnet synchronous motor. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1242–1246 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1242-1246

Широкое распространение синхронных двигателей с постоянными магнитами (СДПМ) в авиационной технике, автомобильном машиностроении, биомедицинской аппаратуре, бытовой технике, робототехнических системах, а также в промышленности, особенно в системах регулирования скорости с большим диапазоном и высоким темпом пусков, остановок и реверса [1], привело к росту исследований в области управления данными двигателями [2, 3]. Контроль за значениями параметров математической модели (сопротивление, индуктивность, момент инерции, коэффициенты сил трения) очень важен в задаче проектирования современных двигателей с встроенной интеллектуальной системой управления и режимом самодиагностики. СДПМ с повышенной надежностью и сроком работы востребованы в современных безлюдных производствах в составе роботизированных комплексов, где участие человека минимально.

Представленная работа посвящена синтезу алгоритма оценивания параметров неявнополюсного СДПМ с поверхностной установкой постоянных магнитов, обеспечивающего глобальную сходимость ошибок оценивания параметров к нулю за конечное время. Схема подключения может быть любая конвенциональная, но это необходимо учесть при переходе к модели двухфазной машины. Алгоритм основан на динамической параметризации нелинейной модели с получением линейного регрессионного соотношения, на основе которого, с использованием метода динамического расширения и смешивания регрессора, формируются оценки всех параметров двигателя.

Типовая двухфазная αβ-модель, описывающая динамику исследуемого СДПМ в неподвижной системе координат, связанной со статором, имеет следующий вид [4]:

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{\theta}} = \boldsymbol{\omega}, \\ j \dot{\boldsymbol{\omega}} = -f \boldsymbol{\omega} + n_p \mathbf{i}^{\mathsf{T}} \mathbf{J} \boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\tau}_L, \\ \dot{\boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{u} - R \mathbf{i}, \\ L \mathbf{i} = \boldsymbol{\lambda} - \lambda_m \mathbf{C}(\boldsymbol{\theta}), \end{cases}$$
(1)

где $\lambda \in \mathbb{R}^2$ — потокосцепление (полный магнитный поток); $\mathbf{i} \in \mathbb{R}^2$ — сила тока в обмотках статора; $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^2$ — напряжение на обмотках статора; L и R — индуктивность и сопротивление обмоток статора; j > 0 — момент инерции ротора; $\theta \in [0, 2\pi]$ — угловое положение ротора; $\omega \in \mathbb{R}$ — механическая угловая скорость; f — коэффициент вязкого трения; $\tau_L \in \mathbb{R}$ — момент нагрузки; n_p — количество пар полюсов; $\lambda_m > 0$ — магнитный поток от постоянных магнитов; матрица $\mathbf{J} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ и вектор $\mathbf{C}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos(n_p \theta) \\ \sin(n_p \theta) \end{bmatrix}$; здесь и далее индекс «Т» означает операцию транспонирования.

На основе выражений для потокосцепления и его производной (1) получим соотношение

$$L\frac{d\mathbf{i}}{dt} = -R\mathbf{i} - \lambda_m n_p \omega \mathbf{J} \mathbf{C}(\theta) + \mathbf{u}.$$
 (2)

Доступными (измеряемыми или вычисленными) сигналами являются сила тока, напряжение обмоток статора и угловое положение ротора. Момент внешней нагрузки предполагается постоянным.

Выполним синтез алгоритма оценивания параметров $\eta_1 = \operatorname{col}(R, L, \lambda_m) \in \mathbb{R}^3$ и $\eta_2 = \operatorname{col}(f, j, \tau_L) \in \mathbb{R}^3$ за конечное время, при условии, что время $t_1 > 0$. Для $t \ge t_1$ получим:

$$\|\hat{\boldsymbol{\eta}}_1(t) - \boldsymbol{\eta}_1\| \le \varepsilon_1, \, \|\hat{\boldsymbol{\eta}}_2(t) - \boldsymbol{\eta}_2\| \le \varepsilon_2, \tag{3}$$

где $\hat{\mathbf{\eta}}_1 = \operatorname{col}(\hat{R}, \hat{L}, \hat{\lambda}_m)$ и $\hat{\mathbf{\eta}}_2 = \operatorname{col}(\hat{f}, \hat{J}, \hat{\mathbf{\tau}}_L)$ — оценки искомых параметров; ε_1 и ε_2 — величина, характеризующая точность оценивания, которая может быть принята равной нулю, если доступные сигналы не искажены шумами или ошибками измерений.

Вопрос оценивания достижимой точности при наличии помех измерения и ее зависимости от параметров алгоритма представляет собой отдельную задачу и в настоящей работе не рассмотрен.

На первом шаге получим регрессионную модель относительно неизвестных параметров **q**₁. Применим к соотношению (2) линейный фильтр вида $\frac{1}{p+\alpha}$, при условии, что $p:=\frac{d}{dt}$ и $\alpha > 0$: $L\frac{p}{p+\alpha}[\mathbf{i}] = -R\frac{1}{p+\alpha}[\mathbf{i}] - \lambda_m \frac{1}{p+\alpha}[n_p \omega \mathbf{JC}(\theta)] +$ (4)

Заметим, что $n_p \omega \mathbf{JC}(\theta) = \frac{d}{dt}(\mathbf{C}(\theta))$, тогда получим соотношение вида

 $+\frac{1}{n+\alpha}\mathbf{u}.$

$$\boldsymbol{\psi}_1 = \boldsymbol{\eta}_1^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\varphi}_1, \tag{5}$$

где $\eta_1 = \text{col}(R, L, \lambda_m) \in \mathbf{R}^3$ и вычислимые функции $\psi_1 \in \mathbf{R}^2$ и $\phi_1 \in \mathbf{R}^{3 \times 2}$

$$\mathbf{\Psi}_1 = \frac{1}{p+\alpha} [\mathbf{u}], \, \mathbf{\varphi}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{p+\alpha} [\mathbf{i}] & \frac{p}{p+\alpha} [\mathbf{i}] & \frac{p}{p+\alpha} [\mathbf{C}(\theta)] \end{bmatrix}.$$

Выберем $k \ge 2$ различных значений параметра линейного фильтра $\alpha = \alpha_k$ в регрессионном уравнении (5), а также добавим масштабирующий коэффициент $\mu_1 > 0$, получим расширенную регрессионную модель

$$\boldsymbol{\Psi}_{1}(t) = \boldsymbol{\eta}_{1}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\Phi}_{1}(t), \tag{6}$$

где $\Psi_1(t) = \mu_1 \operatorname{row}(\Psi_1(t, \alpha_1), ..., \Psi_1(t, \alpha_k)) \in \mathbb{R}^{1 \times 2k},$ $\Phi_1(t) = \mu_1 \operatorname{row}(\varphi_1(t, \alpha_1), ..., \varphi_1(t, \alpha_k)) \in \mathbb{R}^{3 \times 2k}.$

Умножим функции модели (6) на $\Phi_1^{\dagger}(t)$, получим

$$\boldsymbol{\Psi}_{1}(t)\boldsymbol{\Phi}_{1}^{\mathsf{T}}(t) = \boldsymbol{\eta}_{1}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{\Phi}_{1}(t)\boldsymbol{\Phi}_{1}^{\mathsf{T}}(t). \tag{7}$$

Применим процедуру смешивания [5, 6], получим набор скалярных моделей:

$$\mathbf{Z}_{1}(t) = \Delta_{1}(t)\mathbf{\eta}_{1},\tag{8}$$

где $\mathbf{Z}_1^{\mathsf{T}}(t) = (\Psi_1(t)\mathbf{\Phi}_1^{\mathsf{T}}(t)) \operatorname{adj} \{ \mathbf{\Phi}_1(t)\mathbf{\Phi}_1^{\mathsf{T}}(t) \} \in \mathbf{R}^3, \Delta_1(t) =$ = det $\{ \mathbf{\Phi}_1(t)\mathbf{\Phi}_1^{\mathsf{T}}(t) \} \in \mathbf{R}.$

Для получения оценок параметров модели (4) за конечное время воспользуемся модифицированной версией алгоритма градиентного спуска [7, 8]:

$$\hat{\boldsymbol{\eta}}_{1}(t) = \frac{1}{1 - \overline{w}_{1}(t)} (\hat{\boldsymbol{\ell}}_{1}(t) - \hat{\boldsymbol{\ell}}_{1}(0)\overline{w}_{1}(t)), \\ \hat{\boldsymbol{\ell}}_{1}(t) = \gamma_{1}\Delta_{1}(t)(\boldsymbol{Z}_{1}(t) - \Delta_{1}(t)\hat{\boldsymbol{\ell}}_{1}(t)),$$
⁽⁹⁾

где $\gamma > 0$ — коэффициент адаптации, а функция \overline{w}_1 равна:

$$\overline{w}_{1}(t) = \begin{cases} \rho_{1}, w_{1}(t) \ge \rho_{1}, \\ w_{1}(t), w_{1}(t) < \rho_{1}, \\ \dot{w}_{1}(t) = -\gamma_{1}\Delta_{1}^{2}(t)w_{1}(t), \\ w_{1}(0) = 1, \end{cases}$$
(10)

с настроечным параметром $\rho_1 \in (0, 1)$. Алгоритм из выражений (9) и (10) обеспечивает глобальную сходимость ошибки оценивания к нулю в том случае, если

$$\exists t_1 > 0: \int_{0}^{t_1} \Delta_1^2 d\tau \ge -1/\gamma_1 \ln(\rho_1).$$
(11)

На втором шаге применим линейный фильтр вида $\frac{1}{(p+\beta)^2}$, где $p:=\frac{d}{dt}$ и $\beta > 0$, ко второму уравнению системы (1):

$$j\frac{p^2}{(p+\beta)^2}[\theta] = -f\frac{p}{(p+\beta)^2}[\theta] + n_p \frac{1}{(p+\beta)^2}[\mathbf{i}^{\mathsf{T}}\mathbf{J}\boldsymbol{\lambda}] - \tau_L \frac{1}{(p+\beta)^2}[\mathbf{1}(t)],$$

где 1(*t*) — функция Хевисайда.

Перепишем второе уравнение системы (1) в виде линейной регрессии

$$\psi_2 = \mathbf{\eta}_2^\mathsf{T} \boldsymbol{\varphi}_2, \tag{12}$$

где $\eta_2 = \operatorname{col}(j, f, \tau_L) \in \mathbb{R}^3$; $\psi_2 \in \mathbb{R}$ и $\phi_2 \in \mathbb{R}^{1 \times 3}$ — функции вида:

$$\psi_2 = n_p \frac{1}{(p+\beta)^2} [\mathbf{i}^\mathsf{T} \mathbf{J} \boldsymbol{\lambda}],$$
$$\boldsymbol{\phi}_2 = \left[\frac{p^2}{(p+\beta)^2} [\boldsymbol{\theta}] \quad \frac{p}{(p+\beta)^2} [\boldsymbol{\theta}] \quad \frac{1}{(p+\beta)^2} [1(t)] \right].$$

Функция φ_2 может быть вычислена на основе доступного сигнала угла поворота θ , а ψ_2 зависит от недоступного сигнала потокосцепления λ . Благодаря алгоритму состоящему из выражений (9), (10) и четвертому уравнению системы (1) восстановим мгновенное значение потокосцепления и, пользуясь оценкой полного магнитного потока $\hat{\lambda}$ при формировании регрессора, для регрессионного уравнения (12) с тремя различными параметрами β повторим алгоритм из выражений (7)–(10) с масштабирующим коэффициентом $\mu_2 > 0$ для получения оценок $\hat{\eta}_2$:

$$\hat{\mathbf{\eta}}_{2}(t) = \frac{1}{1 - \overline{w}_{2}(t)} (\hat{\ell}_{2}(t) - \hat{\ell}_{2}(0)\overline{w}_{2}(t)),$$

$$\hat{\ell}_{2}(t) = \gamma_{2}\Delta_{2}(t)(\mathbf{Z}_{2}(t) - \Delta_{2}(t)\hat{\ell}_{2}(t)),$$

$$\overline{w}_{2}(t) = \begin{cases} \rho_{2}, w_{2}(t) \ge \rho_{2}, \\ w_{2}(t), w_{2}(t) \le \rho_{2}, \end{cases}$$

$$\dot{w}_{2}(t) = -\gamma_{2}\Delta_{2}^{2}(t)w_{2}(t), w_{2}(0) = 1, \gamma_{2} > 0,$$

$$\mathbf{Z}_{2}^{\mathsf{T}}(t) = (\Psi_{2}(t)\Phi_{2}^{\mathsf{T}}(t)) \text{adj} \{\Phi_{2}(t)\Phi_{2}^{\mathsf{T}}(t)\},$$

$$\Delta_{2}(t) = \det\{\Phi_{2}(t)\Phi_{2}^{\mathsf{T}}(t)\},$$

$$\Psi_{2}(t) = \mu_{2}\text{row}(\hat{\psi}_{2}(t,\beta_{1}), \dots, \hat{\psi}_{2}(t,\beta_{3})),$$

$$\hat{\psi}_{2}(t) = \mu_{2}\text{row}(\phi_{2}(t,\beta_{1}), \dots, \phi_{2}(t,\beta_{3})),$$

$$\hat{\psi}_{2} = n_{p}\frac{1}{(p+\alpha)^{2}}[\mathbf{i}^{\mathsf{T}}\mathbf{J}\hat{\boldsymbol{\lambda}}],$$

$$\phi_{2} = \left[\frac{p^{2}}{(p+\beta)^{2}}[\boldsymbol{\theta}] - \frac{p}{(p+\beta)^{2}}[\boldsymbol{\theta}] - \frac{1}{(p+\beta)^{2}}[1(t)]\right],$$

$$\hat{\boldsymbol{\lambda}} = \hat{\boldsymbol{L}}\mathbf{i} + \hat{\lambda}_{m}\mathbf{C}(\boldsymbol{\theta}).$$
(13)

Полученный алгоритм обеспечивает глобальную сходимость ошибки оценивания к нулю при отсутствии помех измерений и выполнение цели (3) при их наличии, если

$$\exists t_2 > 0: \int_{0}^{t_2} \Delta_2^2 d\tau \ge -\frac{1}{\gamma_2} \ln(\rho_2), \, \rho_2 \in (0, \, 1).$$
 (14)

Для выполнения условия (11) требуется, чтобы в регрессоре ϕ_1 не было линейно зависимых компонент, и достаточно, если его компоненты не сходятся к нулю. Последнее справедливо в обычных режимах функционирования двигателя, кроме его полной остановки. Линейная зависимость может наблюдаться на практике при векторном управлении, если желаемое значение тока *i*_d (сила тока по продольной оси во вращающейся системе координат, связанной с ротором) будет равно нулю. В этой связи для оценивания параметров R и λ_m можно использовать подход инжекции высокочастотного сигнала [9], а именно задать желаемое значение i_d в виде гармонической функции большой частоты и малой амплитуды. Для выполнения условий (14) требуются аналогичные условия для регрессора φ_2 , что может быть обеспечено при непостоянном угловом ускорении. В противном случае, в зависимости от длительности переходных процессов и параметров алгоритма, условия (14) могут быть нарушены.

Отметим, что в предложенном алгоритме использован только параметр количества пар полюсов *n_p*, который можно считать известным, а остальные параметры



Рисунок. Угловая скорость ротора (*a*) и нормы ошибки оценивания параметров для $\hat{\eta}_1(b)$ и $\hat{\eta}_2(c)$ *Figure*. Rotor rotation speed (*a*) and norms of estimation errors for parameters $\hat{\eta}_1(b)$ and $\hat{\eta}_2(c)$

требуют оценки. В этой связи влияние параметрических возмущений исключено. Если рассмотреть помехи измерения, то на практике для уменьшения их влияния можно использовать онлайн версию метода наименьших квадратов с аналогичной модификаций для получения сходимости за конечное время. Отметим, что используемый линейный фильтр может быть заменен на любой другой линейный оператор для лучшей фильтрации сигналов. Полученный алгоритм достаточно чувствителен к смещениям в помехах измеряемых сигналов, поэтому при их наличии можно воспользоваться подходом, предложенным в работе [10], с параметризацией и оцениванием этих смещений.

На рисунке представлены результаты численного моделирования работы двигателя BMP0701F Schneider Electric [2], согласно модели (1), со следующими значениями параметров: R = 8,875 Ом, L = 0,04003 Гн, $n_p = 5, f = 0,05$ Н·м·с, $\lambda_m = 0,2086$ B6, $j = 6\cdot10^{-5}$ кг·м², $\tau_L = 0,1$ Н·м. При этом алгоритм (5)–(10), (12), (13) с параметрами $\gamma_1 = \gamma_2 = 5, \rho = 0,9, \hat{\eta}_1(0) = 0, \hat{\eta}_2(0) = 0, \alpha_1 = 50, \alpha_2 = 100, \beta_1 = 50, \beta_2 = 75, \beta_3 = 100.$

Для регулирования скорости двигателя использовано векторное управление со следующими параметрами для регуляторов скорости $k_p = 0,0528$, $k_i = 23,6871$ и тока $k_p = 0,1601$, $k_i = 35,5$. Требуемая скорость, подаваемая на вход регулятора, составила 15 рад/с. Необходимое значение тока i_q (сила тока по поперечной оси, во вращающейся системе координат, связанной с

Литература

- Sakunthala S., Kiranmayi R., Mandadi P.N. A review on speed control of permanent magnet synchronous motor drive using different control techniques // Proc. of the 2018 International Conference on Power, Energy, Control and Transmission Systems (ICPECTS). 2018. P. 97– 102. https://doi.org/10.1109/icpects.2018.8521574
- Bobtsov A.A., Pyrkin A.A., Ortega R., Vukosavic S.N., Stankovic A.M., Panteley E.V. A robust globally convergent position observer for the permanent magnet synchronous motor // Automatica. 2015. V. 61. P. 47–54. https://doi.org/10.1016/j. automatica.2015.07.032
- Ortega R., Monshizadeh N., Monshizadeh P., Bazylev D., Pyrkin A. Permanent magnet synchronous motors are globally asymptotically stabilizable with PI current control // Automatica. 2018. V. 98. P. 296– 301. https://doi.org/10.1016/j.automatica.2018.09.031

ротором) было сформировано регулятором скорости, а i_d выбрано равным 0,5sin(50t). Внешний момент τ_L приложен с момента времени 0,1 с.

Дополнительно сигналы ψ_1 и ϕ_1 были пропущены через фильтр с передаточной функцией $\frac{50}{p+50}$. Кроме того, на алгоритм оценивания сигналы подавались после завершения переходных процессов на фильтрах, принятого равным 0,2 с, что реализовано с помощью изменения масштабирующих коэффициентов: $\mu_1 = 0$ для $t \in [0; 0,2)$ с и $\mu_1 = 2000$ для $t \ge 0,2$ с, $\mu_2 = 0$ для $t \in [0; 0,4)$ с и $\mu_2 = 5000$ для $t \ge 0,4$ с.

В измерения силы тока добавлена помеха с равномерным случайным распределением [-0,05; 0,05] А, а в значения напряжения, поступающие на вход алгоритма, помеха с равномерным случайным распределением [-0,1; 0,1] В. Важно, что напряжение, как правило, было не измерено, а вычислено, а соответствующая систематическая ошибка расчетов смоделирована подачей на алгоритм зашумленных значений напряжения, умноженных на 0,99. Сила тока после завершения переходного процесса была изменена в диапазоне [-0,85; 0,85] А, а напряжение — [-23,5; 23,5] В.

На рисунке видно, что предложенный алгоритм оценивания обеспечил сходимость норм векторов ошибок оценивания параметров в некоторую малую область при наличии помех измерения и систематической ошибки расчета напряжения.

References

- Sakunthala S., Kiranmayi R., Mandadi P.N. A review on speed control of permanent magnet synchronous motor drive using different control techniques. *Proc. of the 2018 International Conference on Power, Energy, Control and Transmission Systems (ICPECTS)*, 2018, pp. 97– 102. https://doi.org/10.1109/icpects.2018.8521574
- Bobtsov A.A., Pyrkin A.A., Ortega R., Vukosavic S.N., Stankovic A.M., Panteley E.V. A robust globally convergent position observer for the permanent magnet synchronous motor. *Automatica*, 2015, vol. 61, pp. 47–54. https://doi.org/10.1016/j. automatica.2015.07.032
- Ortega R., Monshizadeh N., Monshizadeh P., Bazylev D., Pyrkin A. Permanent magnet synchronous motors are globally asymptotically stabilizable with PI current control. *Automatica*, 2018, vol. 98, pp. 296–301. https://doi.org/10.1016/j.automatica.2018.09.031

- Nam K.H. AC Motor Control and Electric Vehicle Applications. CRC Press, 2010. 435 p.
- Aranovskiy S., Bobtsov A., Ortega R., Pyrkin A. Performance enhancement of parameter estimators via dynamic regressor extension and mixing // IEEE Transactions on Automatic Control. 2017. V. 62. N 7. P. 3546–3550. https://doi.org/10.1109/tac.2016.2614889
- Ortega R., Aranovskiy S., Pyrkin A.A., Astolfi A., Bobtsov A.A. New results on parameter estimation via dynamic regressor extension and mixing: Continuous and discrete-time cases // IEEE Transactions on Automatic Control. 2021. V. 66. N 5. P. 2265–2272. https://doi. org/10.1109/tac.2020.3003651
- Pyrkin A., Bobtsov A., Ortega R., Vedyakov A., Aranovskiy S. Adaptive state observers using dynamic regressor extension and mixing // Systems & Control Letters. 2019. V. 133. P. 104519. https:// doi.org/10.1016/j.sysconle.2019.104519
- Pyrkin A., Bobtsov A., Ortega R., Vedyakov A., Cherginets D., Ovcharov A., Bazylev D., Petranevsky I. Robust nonlinear observer design for permanent magnet synchronous motors // IET Control Theory & Applications. 2021. V. 15. N 4. P. 604–616. https://doi. org/10.1049/cth2.12065
- Jang J.H., Ha J.I., Ohto M., Ide K., Sul S.K. Analysis of permanentmagnet machine for sensorless control based on high-frequency signal injection // IEEE Transactions on Industry Applications. 2004. V. 40. N 6. P. 1595–1604. https://doi.org/10.1109/tia.2004.836222
- Pyrkin A.A., Vedyakov A.A., Ortega R., Bobtsov A.A. A robust adaptive flux observer for a class of electromechanical systems // International Journal of Control. 2020. V. 93. N 7. P. 1619–1629. https://doi.org/10.1080/00207179.2018.1521995

Авторы

Пыркин Антон Александрович — доктор технических наук, профессор, профессор, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, вс 26656070700, https://orcid.org/0000-0001-8806-4057, pyrkin@itmo.ru

Ведяков Алексей Алексеевич — кандидат технических наук, доцент, доцент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, вс 49664023200, https://orcid.org/0000-0003-4336-1220, vedyakov@itmo.ru

Голубев Антон Кириллович — аспирант, ассистент, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, https://orcid. org/0009-0008-6951-2799, akgolubev@itmo.ru

Статья поступила в редакцию 29.09.2023 Одобрена после рецензирования 27.10.2023 Принята к печати 22.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

- Nam K.H. AC Motor Control and Electric Vehicle Applications. CRC Press, 2010, 435 p.
- Aranovskiy S., Bobtsov A., Ortega R., Pyrkin A. Performance enhancement of parameter estimators via dynamic regressor extension and mixing. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2017, vol. 62, no. 7, pp. 3546–3550. https://doi.org/10.1109/tac.2016.2614889
- Ortega R., Aranovskiy S., Pyrkin A.A., Astolfi A., Bobtsov A.A. New results on parameter estimation via dynamic regressor extension and mixing: Continuous and discrete-time cases. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2021, vol. 66, no. 5, pp. 2265–2272. https://doi. org/10.1109/tac.2020.3003651
- Pyrkin A., Bobtsov A., Ortega R., Vedyakov A., Aranovskiy S. Adaptive state observers using dynamic regressor extension and mixing. *Systems & Control Letters*, 2019, vol. 133, pp. 104519. https://doi.org/10.1016/j.sysconle.2019.104519
- Pyrkin A., Bobtsov A., Ortega R., Vedyakov A., Cherginets D., Ovcharov A., Bazylev D., Petranevsky I. Robust nonlinear observer design for permanent magnet synchronous motors. *IET Control Theory & Applications*, 2021, vol. 15, no. 4, pp. 604–616. https://doi. org/10.1049/cth2.12065
- D. Jang J.H., Ha J.I., Ohto M., Ide K., Sul S.K. Analysis of permanentmagnet machine for sensorless control based on high-frequency signal injection. *IEEE Transactions on Industry Applications*, 2004, vol. 40, no. 6, pp. 1595–1604. https://doi.org/10.1109/tia.2004.836222
- Pyrkin A.A., Vedyakov A.A., Ortega R., Bobtsov A.A. A robust adaptive flux observer for a class of electromechanical systems. *International Journal of Control*, 2020, vol. 93, no. 7, pp. 1619–1629. https://doi.org/10.1080/00207179.2018.1521995

Authors

Anton A. Pyrkin — D.Sc., Full Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, S€ 26656070700, https://orcid. org/0000-0001-8806-4057, pyrkin@itmo.ru

Alexey A. Vedyakov — PhD, Associate Professor, Associate Professor, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, Sc 49664023200, https://orcid.org/0000-0003-4336-1220, vedyakov@ itmo.ru

Anton K. Golubev — PhD Student, Assistant, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, https://orcid.org/0009-0008-6951-2799, akgolubev@itmo.ru

Received 29.09.2023 Approved after reviewing 27.10.2023 Accepted 22.11.2023 **I/İTMO**

HAVЧHO-TEXHIVECKИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ ноябрь-декабрь 2023 Том 23 № 6 http://ntv.ifmo.ru/ SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS November-December 2023 Vol. 23 No 6 http://ntv.ifmo.ru/en/ ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКІ

doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1247-1250 УДК 621.382

Проблемы защиты содержимого внутренней памяти микроконтроллеров Renesas

Кирилл Константинович Кондрашов¹, Алла Борисовна Левина²

^{1,2} Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197022, Российская Федерация

1 kondrashovkk@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8889-320X

² alla levina@mail.ru^{\equiv}, https://orcid.org/0000-0003-4421-2411

Аннотация

Рассмотрена проблема защиты информации, содержащейся во внутренней памяти микроконтроллеров семейства Renesas RL78. Выявлена и исследована уязвимость этих микроконтроллеров, позволяющая извлекать данные из встроенной флэш-памяти с использованием программатора. Протестирован способ автоматизированного восстановления содержимого всей области памяти, в основе которого лежит специально разработанное программное обеспечение. Результаты исследования свидетельствуют о недостаточной эффективности реализованных производителем мер ограничения доступа. Описан вариант изменения управляющей команды программатора, ведущий к повышению защищенности данных. Представлена методика полного восстановления данных флэш-памяти, протестированная в программе, разработанной в среде LabVIEW.

Ключевые слова

информационная безопасность, микроконтроллер, Renesas RL78, флэш-память, извлечение данных

Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-01024-21-02 от 29.09.2021 (проект FSEE-2021-0014).

Ссылка для цитирования: Кондрашов К.К., Левина А.Б. Проблемы защиты содержимого внутренней памяти микроконтроллеров Renesas // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23, № 6. С. 1247–1250. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1247-1250

Internal memory data protecting problems of the Renesas microcontrollers Kirill K. Kondrashov¹, Alla B. Levina²

1,2 Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, 197022, Russian Federation

¹ kondrashovkk@mail.ru, https://orcid.org/0000-0001-8889-320X

² alla levina@mail.ru^{\vee}, https://orcid.org/0000-0003-4421-2411

Abstract

The problem of protecting the information contained in the internal memory of the Renesas RL78 Family Microcontrollers is considered. The vulnerability of these microcontrollers has been identified and investigated, which allows extracting data from the built-in flash memory using a programmer. A method of automated recovery of the contents of the entire memory area, based on specially developed software, has been tested. The results of the study indicate the insufficient effectiveness of the access restriction measures implemented by the manufacturer. A variant of changing the programmer's control command, leading to an increase in data security, is described. A technique for complete recovery of flash memory data is presented, tested in a program developed in the LabVIEW environment.

Keywords

information security, MCU, Renesas RL78, flash memory, data extraction

Acknowledgements

The work was supports by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation No. 075-01024-21-02 dated 09/29/2021 (project FSEE-2021-0014).

© Кондрашов К.К., Левина А.Б., 2023

For citation: Kondrashov K.K., Levina A.B. Internal memory data protecting problems of the Renesas microcontrollers. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1247–1250 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-6-1247-1250

В настоящее время микроконтроллеры общего назначения широко применяются в электронике. Зачастую они обрабатывают информацию конфиденциального характера, например: коды доступа, пароли и ключи шифрования. Данные такого рода, хранящиеся во внутренней памяти, должны надежно защищаться от угроз, связанных с посторонним вмешательством. Предусмотренные производителями способы ограничения доступа к устройствам с целью защиты информации иногда оказывается недостаточными. Эксплуатация конструктивных уязвимостей может оказаться эффективным способом для извлечения данных из внутренней памяти [1]. Особый интерес представляют неинвазивные методы получения информации, при использовании которых сохраняется целостность корпуса и работоспособность устройства. В зависимости от наличия внешнего воздействия на объект эти методы подразделяются на активные и пассивные [2]. Первый тип характеризуется большей гибкостью и в некоторых случаях позволяет открыть доступ к статической памяти при установленной производителем защите. В настоящей работе рассмотрена одна из серьезных проблем безопасности, обнаруженная в микроконтроллерах Renesas, применяемых в бытовой электронике. При исследовании этих микроконтроллеров поставлена задача анализа возможностей восстановления защищаемой информации с использованием только стандартных средств, предназначенных для программирования и отладки, без специализированного дорогостоящего оборудования.

Проблема защиты данных, содержащихся во внутренней памяти микроконтроллеров, является особенно актуальной в условиях широкого распространения электроники во всех сферах жизни. Практически в любых устройствах важно обеспечивать сохранность не только программного кода, заложенного производителем, но и разнообразных пользовательских данных конфиденциального характера. С целью ограничения стороннего доступа к такой информации в микроконтроллерах применяются различные способы защиты памяти.

Можно выделить несколько распространенных типов защиты от извлечения содержимого внутренней памяти при подключении микроконтроллера к программатору: бит секретности; установка пароля; шифрование данных; запрет поддержки операции чтения.

Установка бита секретности обеспечивает высокую степень защиты и является наиболее простым вариантом при технической реализации. Этими факторами обусловлено широкое распространение данного решения в продукции различных фирм-производителей. Несмотря на очевидные достоинства данного способа, исследования [3–5] показали, что защита может быть преодолена с помощью инвазивных и неинвазивных методов. Например, обойти бит секретности помогают манипуляции с напряжением питания некоторых устройств и облучение соответствующей ячейки на кристалле при локальном вскрытии корпуса [6]. Защита с помощью пароля более надежна по сравнению с установкой бита секретности, так как изменить каким-либо образом одновременно много битов или предотвратить обращение системы к ним без нарушения дальнейшего функционирования крайне затруднительно. Для хранения пароля может использоваться как отдельная область памяти, так и особая адресная зона в общем пространстве. В последнем случае в качестве пароля может выступать любая байтовая последовательность, которая изначально предназначена для других функций согласно коду микропрограммы. Такой подход упрощает реализацию защиты при сохранении эффективности и иногда встречается на практике [7].

Применение шифрования данных всей внутренней памяти или наиболее критичной к утечкам ее части является надежным способом защиты исходной информации, если обеспечивается высокая защищенность ключа. Очевидно, что для обработки данных требуется предварительная дешифровка, поэтому микроконтроллеру должен быть известен ключ. Хранение ключа в такой же энергонезависимой памяти на кристалле делает устройство уязвимым к различным методам анализа, в том числе по побочным каналам [8, 9]. В зависимости от алгоритма шифрования можно использовать один из множества способов, чтобы попытаться восстановить исходные данные, но дополнительная сложность возникает из-за большой трудоемкости и длительности процесса.

Невозможность произвести считывание по причине отсутствия поддержки микропроцессором такой операции, на первый взгляд, должна обеспечивать наилучшую защиту из всех возможных. Тем не менее, даже в таких условиях все еще доступно выполнение других операций с внутренней памятью. Как показывает практика, их определенная комбинация тоже может быть неявным способом обхода защиты и полного восстановления данных.

Семейство микроконтроллеров Renesas RL78 включает в себя множество моделей, которым свойственна широкая область применения¹. Ключевой особенностью всех моделей этого семейства является принципиальное отсутствие возможности считывания содержимого внутренней памяти при подключении к программатору. Загрузка данных из флэш-памяти микроконтроллеров не предусмотрена производителем в целях обеспечения безопасности.

В настоящей работе исследованы 8-битные микроконтроллеры Renesas серии 78K0S², архитектура встро-

¹ Renesas RL78 Family Microcontrollers [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.renesas.com/us/en/document/ fly/rl78-family-microcontrollers-brochure, свободный. Яз. англ. (дата обращения: 10.07.2023).

² 78K0S/KY1+ 8-Bit Single-Chip Microcontrollers [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.renesas.com/in/ en/document/mah/78k0sky1-users-manual, свободный. Яз. англ. (дата обращения: 10.07.2023).

Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики, 2023, том 23, № 6 Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics, 2023, vol. 23, no 6

енной памяти которых аналогична устройствам семейства RL78. Принципиальные отличия нового семейства заключаются в сокращенном наборе команд программирования. Экспериментально выявлено, что микроконтроллеры обладают существенной уязвимостью, которая дает возможность восстанавливать содержимое флэш-памяти. Процедура восстановления основана на циклических операциях записи ячейки и считывания контрольной суммы массива флэш-памяти. Реализация данной методики оказалась возможной из-за того, что в серии 78K0S запись данных флэш-памяти производится побайтно, в отличие от серии 78КО, где запись выполняется блоками по четыре байта¹. Ключевую роль играют конструктивные и схемотехнические особенности строения массива ячеек, вследствие которых запись нулевого байта (00h) поверх любого другого значения, хранящегося в ячейке, является допустимой и всегда проходит успешно без повреждения данных. Решающим фактором стало то, что расчет контрольной суммы флэш-памяти в серии 78К0S осуществлен побайтно по описанной в документации методике².

Обнаруженная уязвимость состоит в изменении одного байта исходного массива, при котором изменяется контрольная сумма. Далее с помощью разработанного обратного алгоритма по известному значению контрольной суммы установлено первоначальное значение перезаписанного байта. При этом восстановление выполнено только по одному байту в инверсном порядке, начиная с адреса последней ячейки памяти. Контрольная сумма данных в устройствах семейства RL78 вычислено по алгоритму циклического избыточного кода (CRC)³. Значение CRC с математической точки зрения определено функцией *f* от набора байтов b_0, \ldots, b_{N-1} для *N* ячеек памяти:

$$CRC = f(b_0, ..., b_{N-1}).$$

После замещения первого байта нулевым значением контрольная сумма массива имеет следующий вид:

$CRC' = f(0, b_1, ..., b_{N-1}).$

Первоначальное значение перезаписанного байта рассчитано в результате применения обратной функции к массиву, в котором байты $b_1, ..., b_{N-1}$ известны:

$$b_0 = f^{-1}(CRC, b_1, \dots, b_{N-1}).$$

Методика полного восстановления данных флэш-памяти универсальна для любых устройств семейства Renesas RL78. Выделим следующие основные шаги методики.

Шаг 1. Считывание и сохранение контрольной суммы всей флэш-памяти.

Шаг 2. Запись нулевого байта в первую ячейку анализируемого микроконтроллера (с младшим адресом).

Шаг 3. Повторение шагов 1 и 2 для последующих ячеек, до предпоследней.

Шаг 4. Получение массива контрольных сумм, размерность которого равна объему памяти.

Шаг 5. Запуск специализированного программного обеспечения, которое предназначено для восстановления содержимого флэш-памяти по массиву контрольных сумм.

Шаг 6. Получение и сохранение результата.

Предложенная методика протестирована в программе, разработанной в среде LabVIEW. В программу был загружен массив контрольных сумм. Автоматизация вычислений позволила быстро восстановить всю область флэш-памяти микроконтроллера.

Защищенность микроконтроллеров семейства RL78 от доступа к данным флэш-памяти нельзя обеспечить установкой аппаратного запрета на операции записи, что возможно в устройствах других семейств. Обязательное предварительное стирание памяти перед записью, предусмотренное командой загрузки кода, является эффективной защитой от восстановления содержимого с использованием общедоступных средств.

В результате проведенных исследований выявлена уязвимость микроконтроллеров Renesas семейства RL78, позволяющая извлекать информацию из внутренней памяти. Защитные меры в виде отсутствия функции чтения памяти через программатор имеют серьезный вид, но оказываются недостаточными для обеспечения надежности хранения конфиденциальных данных. Относительная простота реализации доступа повышает уровень угрозы постороннего вмешательства. Возможность восстановления данных из всего адресного пространства открывает путь для копирования микропрограммного кода, охраняемого авторскими правами. Предварительное стирание памяти перед записью ограничивает применимость стандартных средств для извлечения информации, что ведет к повышению защищенности.

¹ 78K0/Kx2 8-Bit Single-Chip Microcontrollers Flash Memory Programming [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.renesas.com/us/en/document/apn/78k0kx2-flashmemory-programming-programmer, свободный. Яз. англ. (дата обращения: 10.07.2023).

² 78K0S/Kx1+ 8-Bit Single-Chip Microcontrollers Flash Memory Programming [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.renesas.com/in/en/document/apn/78k0skx1-flashmemory-programming-programmer, свободный. Яз. англ. (дата обращения: 10.07.2023).

³ RL78 Microcontroller (RL78 Protocol B) Serial Programming Guide [Электронный ресурс]. Режим доступа: https://www.renesas.com/eu/en/document/apn/rl78-family-rl78microcontroller-rl78-protocol-b-serial-programming-guide, свободный. Яз. англ. (дата обращения: 10.07.2023).

Литература

- Tunstall M. Smart card security // Smart Cards, Tokens, Security and Applications. Springer, Cham, 2017. P. 217–251. https://doi. org/10.1007/978-3-319-50500-8 9
- Spreitzer R., Moonsamy V., Korak T., Mangard S. Systematic classification of side-channel attacks: A case study for mobile devices // IEEE Communications Surveys and Tutorials. 2018. V. 20. N 1. P. 465–488. https://doi.org/10.1109/comst.2017.2779824
- Кондрашов К.К., Денисов А.К., Лучинин В.В. Неразрушающая методика контроля данных ПЗУ по каналу энергопотребления // Петербургский журнал электроники. 2017. № 2-3. С. 97–102.
- Skorobogatov S.P. Semi-invasive attacks A new approach to hardware security analysis / University of Cambridge, Computer Laboratory. 2005. Technical Report No. 630. [Электронный ресурс]. URL: http://www.cl.cam.ac.uk/techreports/UCAM-CL-TR-630.pdf, свободный. Яз. англ. (дата обращения: 10.07.2023).
- Kaur S., Singh B., Kaur H. Stratification of hardware attacks: Side channel attacks and fault injection techniques // SN Computer Science. 2021. V. 2. N 3. P. 183. https://doi.org/10.1007/s42979-021-00562-3
- Лучинин В.В., Садовая И.М. Информационная безопасность смарт-микросистем и технологий. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2015. 157 с.
- Семейство микроконтроллеров MSP430. Рекомендации по применению: пер. с англ. М.: Компэл, 2005. 544 с. (Библиотека Компэла)
- Кондрашов К.К., Ершов М.И., Гасников А.О. Современное состояние диагностики микропроцессорных систем по нетрадиционным побочным каналам // Известия СПбГЭТУ «ЛЭТИ». 2016. № 3. С. 3–9.
- Alashik K., Efe A. Side channel attack // Gazi University Journal of Science. Part A: Engineering and innovation. 2019. V. 6. N 3. P. 61– 73.

Авторы

Кондрашов Кирилл Константинович — младший научный сотрудник, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197022, Российская Федерация, https://orcid.org/0000-0001-8889-320X, kondrashovkk@mail.ru

Левина Алла Борисовна — кандидат физико-математических наук, доцент, доцент, Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург, 197022, Российская Федерация, so 56427692900, https:// orcid.org/0000-0003-4421-2411, alla levina@mail.ru

Статья поступила в редакцию 31.07.2023 Одобрена после рецензирования 19.10.2023 Принята к печати 10.11.2023



Работа доступна по лицензии Creative Commons «Attribution-NonCommercial»

References

- Tunstall M. Smart card security. Smart Cards, Tokens, Security and Applications. Springer, Cham, 2017, pp. 217–251. https://doi. org/10.1007/978-3-319-50500-8 9
- Spreitzer R., Moonsamy V., Korak T., Mangard S. Systematic classification of side-channel attacks: A case study for mobile devices. *IEEE Communications Surveys and Tutorials*, 2018, vol. 20, no. 1, pp. 465–488. https://doi.org/10.1109/comst.2017.2779824
- Kondrashov K.K., Denisov A.K., Luchinin V.V. Non-destructive method for ROM data monitoring via the energy consumption channel. *Petersburg Electronics Journal*, 2017, no. 2-3, pp. 97–102. (in Russian)
- Skorobogatov S.P. Semi-invasive attacks A new approach to hardware security analysis. University of Cambridge, Computer Laboratory. 2005. Technical Report No. 630. Available at: http://www. cl.cam.ac.uk/techreports/UCAM-CL-TR-630.pdf. (accessed: 10.07.2023).
- Kaur S., Singh B., Kaur H. Stratification of hardware attacks: Side channel attacks and fault injection techniques. *SN Computer Science*, 2021, vol. 2, no. 3, pp. 183. https://doi.org/10.1007/s42979-021-00562-3
- Luchinin V.V., Sadovaia I.M. Information Security of Smart Microsystems and Technologies. St. Petersburg, Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI" Publ., 2015, 157 p. (in Russian)
- MSP430 Family of Microcontrollers. Usage Tips. Moscow, Kompel, 2005, 544 p. (in Russian)
- Kondrashov K.K., Ershov M.I., Gasnikov A.O. Side-channel diagnostics for microprocessor devices: current state. *Proceedings of Saint Petersburg Electrotechnical University Journal*, 2016, no. 3, pp. 3–9. (in Russian)
- Alashik K., Efe A. Side channel attack. *Gazi University Journal of Science. Part A: Engineering and innovation*, 2019, vol. 6, no. 3, pp. 61–73.

Authors

Kirill K. Kondrashov — Junior Researcher, Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, 197022, Russian Federation, https://orcid.org/0000-0001-8889-320X, kondrashovkk@ mail.ru

Alla B. Levina — PhD (Physics & Mathematics), Assiciate Professor, Associate Professor, Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI", Saint Petersburg, 197022, Russian Federation, sc 56427692900, https://orcid.org/0000-0003-4421-2411, alla_levina@mail.ru

Received 31.07.2023 Approved after reviewing 19.10.2023 Accepted 10.11.2023

ТРЕБОВАНИЯ К ОФОРМЛЕНИЮ СТАТЕЙ

Журнал публикует научные обзоры, полнотекстовые статьи и краткие сообщения.

Полнотекстовая статья должна иметь четкую структуру, включающую в себя аннотацию, ключевые слова, введение, несколько содержательных разделов и заключение.

В аннотации, рассчитанной на самый широкий круг читателей, необходимо в объеме 200–400 слов в форме краткого реферата (Abstract) изложить научное содержание статьи: предмет, цель работы, метод или методология проведения работы, краткое описание эксперимента, полученные результаты, рекомендации по их применению.

Ключевые слова должны отражать информацию, представленную в статье. Основное ключевое слово указывается первым.

Во введении необходимо представить содержательную постановку рассматриваемого вопроса, провести краткий анализ известных из научной литературы решений (со ссылками на источники), дать критику их недостатков, показать научную новизну и преимущество (особенности) предлагаемого подхода.

В основном тексте статьи должна быть представлена строгая постановка решаемой задачи, изложены и обстоятельно разъяснены (доказаны) полученные утверждения и выводы, приведены результаты экспериментальных исследований или математического моделирования, иллюстрирующие сделанные утверждения. Основной текст статьи должен быть разбит на содержательные разделы (2–3 раздела).

В заключении необходимо кратко сформулировать основные результаты, прокомментировать их и, если возможно, указать направления дальнейших исследований и области применения.

Пристатейный список литературы (рекомендуется): для обзорной статьи — не менее 50, для полнотекстовой статьи — не менее 15, для краткого сообщения — не менее 8 литературных источников.

Ссылки на стандарты и иные нормативные документы, а также на неперсонифицированные интернет-ресурсы в список литературы не вносятся, а оформляются в виде сносок.

Объем обзорной статьи предварительно согласовывается с редакцией.

Объем полнотекстовой статьи, включая иллюстрации, таблицы и список литературы, не должен превышать 8 страниц машинописного текста (с рисунками и таблицами), шрифт 12 pt, один интервал.

Объем краткого сообщения — до 3 страниц, шрифт 12 pt, один интервал. Рубрикация текста не требуется. Статьи принимаются в электронном виде (ntvitmo@itmo.ru). В распечатанном виде с подписями авторов материалы представляются в редакцию по запросу редакции после прохождения процедуры рецензирования. Комплект документов должен включать:

текст статьи с заверстанными рисунками и таблицами;

- формы сведений об авторах (на каждого автора); допускается
- указание нескольких мест работы автора;
 файлы с рисунками к статье в оригинальном формате (предпочтительно JPEG) с максимальным разрешением; допускается представление цветных рисунков, если в черно-белом варианте теряется полезная информация;
- лицензионное соглашение;
- согласие на обработку персональных данных.

REQUIREMENTS FOR EXECUTION OF PAPERS

Scientific reviews, full-text and brief papers are published.

A full-text paper should have a well-defined structure, including an abstract, keywords, introduction, several substantive chapters and a conclusion.

An abstract is intended for general public. It is necessary to set forth the scientific content of the paper limited by 200–400 words in the form of a brief abstract: the subject, the work objective, the method or methodology of work, a brief description of the experiment, obtained results, recommendations for their application.

Keywords should be connected with the information presented in the paper. The main keyword is given first.

The introduction should contain a meaningful statement of the issue in question, a brief analysis of the solutions known from scientific literature (with references to sources), a criticism of their shortcomings, scientific novelty and advantages (features) of the proposed approach.

The main body of the paper should represent exact statement of the problem being solved, obtained assertions and conclusions are to be set forth and explained in detail (proved), the results of experimental studies or mathematical modeling should be given to illustrate the statements made. The main text of the paper needs to be split up into meaningful sections (2–3 sections).

In conclusion it is necessary to summarize the main results, comment on them and, if possible, to indicate the areas of future research and application.

A list of references is recommended: for a review paper — at least 50 items, for full-text paper — not less than 15, for a brief paper — at least 8 references. References to standards and other regulatory documents, as well as to Internet resources, are not included in a reference list and are documented as footnotes.

The length of a review paper is coordinated with the editorial board beforehand.

The length of a full-text paper, including illustrations, tables and references, should not exceed 8 pages of typewritten text (figures and tables included), font 12 pt, single-spaced.

The length of a brief paper is up to 3 pages, font 12 pt, single-spaced.

No rubrication is required.

Papers are accepted in electronic form (ntvitmo@itmo.ru).

Materials are submitted to the editors on request after the procedure of reviewing in a printed form signed by the authors. A set of documents should include:

- The text of the paper with make-up figures and tables;
- The forms with information about the authors (for each author), several employers can be specified by the author;
- Files with pictures to the paper in their original format (preferably JPEG) with the maximum resolution; should useful information is lost in the black and white variant, color drawings are permitted;
- Publishers license agreement;
- · Consent to the processing of personal data.

SCIENTIFIC AND TECHNICAL IOURNAL OF ITMO UNIVERSITY FORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND 2023, VOLUME 23, NUMBER 6 (NOVEMBER-DECEMBER) ISSN 2226-1494 (PRINT), 2500-0373 (ONLINE)

OPTICAL ENGINEERING

Modeling the illumination of the Earth's surface to select the operating modes of the radiation source Luminescent dynamics of oxygen oxidation of Viburnum opulus L. in chitosan solutions with gold nanoparticles

AUTOMATIC CONTROL AND ROBOTICS

Dynamic surface control for omnidirectional mobile robot with full state constrains and input saturation (in English)

MATERIALS SCIENCE AND NANOTECHNOLOGIES

Dual-wavelength digital holographic interferometry for technical applications Structural analysis of ZrO2 and TiO2 nanoparticles (in English) Investigation of polyvinyl butyral coatings with carbon quantum dots on the characteristics of silicon solar cells Numerical algorithm for finding the optimal composition of the reacting mixture

on the basis of the reaction kinetic model Raman spectroscopy of nanocomposites ZnO/ZnS and ZnO/ZnSe obtained

by solvothermal-microwave synthesis method (in English)

COMPUTER SCIENCE

Emotion analysis of social network data using cluster based probabilistic neural network with data parallelism (in English) Assessing the possibility of using the method of image decomposition based on topological features to reduce entropy during image compression Implementation of neural networks in the method of multilevel component circuits

Fuzzy logic controller algorithm for placing files in a data storage system ARTIFICIAL INTELLIGENCE AND COGNITIVE INFORMATION

TECHNOLOGIES

Personalization of convolutional neural networks within the stress detection task using heart rate variability data (in English) Using topological data analysis for building Bayesan neural networks

MODELING AND SIMULATION

Method of modeling viscoelastic properties of oriented polymer materials using multi-barrier theory

Design of microstrip patch antenna using Fennec Fox optimization with SSRR metamaterial for terahertz applications (in English)

Algorithm for promptly maintaining the temperature regime of power amplification units of the radar transmitting complex based on a thermal model Convective heat transfer and hydrodynamics of flow at the endwall around a turbine

blade under the influence of a magnetic field (in English)

Methods of contactless registration of information signals for the audit of information security of power supply systems and networks

BRIEF PAPERS

Parameter estimation of permanent magnet synchronous motor Internal memory data protecting problems of the Renesas microcontrollers

Altuchov A.I., Korshunov D.S.	1077
Tsibulnikova A.V., Zemlyakova E.S., Artamonov D.A., Slezhkin V.A., Samusev I.G., Zubin A.Yu., Bryukhanov V.V.	1084
Zhiqiang C., Krasnov A.Yu., Duzhesheng L., Qiusheng Y.	1096

1106

Alekseenko I.V., Kozhevnikova A.M. 1114 Imanova G 1122 Korchagin V.N., Sysoev I.A., Ratushny V.I., Mitrofanov D.V., Chapura O.M. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. 1128 1136 Rati Y., Rini A.S., Akrajas A.U., Agustin M. Starlin Jini S., Chenthalir Indra N. 1143 Abakumov A.V., Eremeev S.V. 1152 Kochergin M.I. 1162 Tatarnikova T.M., Arkhiptsev E.D. 1171

Dobrokhvalov M.O., Filatov A.Yu.							1178
			_			** ~	

Vatian A.S., Gusarova N.F., Dobrenko D.A., Pankova K.S., 1187 Tomilov I.V.

Golovina V.V., Rymkevich P.P.	1198
Kumari S., Kumar A., Anbalagan E., Kumar Thoti K., Sharma M.	1205
Shafir R.S., Davydova M.A., Korpusov M.O., Perlov A.Yu., Timoshenko A.V.	1214
Arjun K.S., Tide P.S.	1223
Grishentsev A.Yu., Arustamov S.A., Karmanovsky N.S., Goroshkov V.A., Chernov R.I.	1233
	12.42

Pyrkin A.A., Vedyakov A.A., Golubev A.K. 1242 Kondrashov K.K., Levina A.B. 1247